

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN**

**FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA**



**EVALUACIÓN TEÓRICA DE LA REFLECTANCIA EN CAPAS  
DELGADAS DE AL/SiO<sub>2</sub> DEPOSITADAS MEDIANTE *SPUTTERING*  
PARA APLICACIONES EN RECUBRIMIENTOS ÓPTICOS.**

**POR**

**ING. JESÚS JAVIER ORTEGA CABRERA**

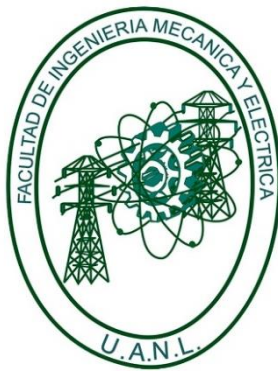
**TESIS EN OPCIÓN AL GRADO DE  
MAESTRÍA EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA CON ORIENTACIÓN  
EN MATERIALES**

**ENERO, 2021.**

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN**

**FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA**

**SUBDIRECCIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO**



**EVALUACIÓN TEÓRICA DE LA REFLECTANCIA EN CAPAS  
DELGADAS DE  $\text{Al/SiO}_2$  DEPOSITADAS MEDIANTE *SPUTTERING*  
PARA APLICACIONES EN RECUBRIMIENTOS ÓPTICOS.**

**POR**

**ING. JESÚS JAVIER ORTEGA CABRERA**

**TESIS EN OPCIÓN AL GRADO DE  
MAESTRÍA EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA CON ORIENTACIÓN  
EN MATERIALES**

**ENERO, 2021.**



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

UANL



FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA

**Universidad Autónoma de Nuevo León**  
**Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica**  
**Subdirección de Estudios de Posgrado**

Los miembros del Comité de Tesis recomendamos que la Tesis "Evaluación teórica de la reflectancia en capas delgadas de  $\text{Al/SiO}_2$  depositadas mediante *sputtering* para aplicaciones en recubrimientos ópticos", realizada por el alumno Ing. Jesús Javier Ortega Cabrera, con número de matrícula 1988519, sea aceptada para su defensa como requisito para obtener el grado de Maestría en Ciencias de la Ingeniería con orientación en Materiales.

El Comité de Tesis

Moisés Hinojosa Rivera  
Director

Alberto Varela Valdez  
Revisor

Gilberto Martínez  
Revisor

Vo. Bo.

Dr. Simón Martínez Martínez  
Subdirector de Estudios de Posgrado

San Nicolás de los Garza, Nuevo León, enero de 2021



Ciudad Universitaria Pedro de Alba s/n, C.P. 66455. A.P. 076 Suc. "F"  
San Nicolás de los Garza, Nuevo León, México. Tels: (81) 8332 0903 /  
Comm.: 8329 4020 / Fax: (81) 8332 0904

## DEDICATORIA

*A mis padres, a mis hermanos, a mi esposa,  
a mi suegra, a mi cuñado, a mi hijo y a mi  
sobrino.*

## AGRADECIMIENTOS

A esta gran nación mexicana, por brindarme una oportunidad de crecimiento profesional y humano, mediante la UANL desde hoy mi segunda *alma mater*.

Al Dr. Moisés Hinojosa, un Maestro en el ámbito académico y en el ámbito fraternal. Ha sido una suerte contar con su guía “Doc”, sabe que lo aprecio. Mi gratitud siempre para usted.

A la empresa *Varroc Lighting Systems*®, Monterrey. En especial al Ing. Alfonso Macías por esta oportunidad para colaborar y realizar este Trabajo Diploma.

A CONACYT por el apoyo económico durante estos 24 meses, por la confianza en mí. Gracias “Tía Cony”.

A toda una gran familia que Dios me ha regalado en estos 2 años. A José y a Amy que no solo abrieron las puertas de su hogar, sino las de sus corazones para mi familia. Mi agradecimiento será eterno para ellos.

A Juan Luis y a Jeydi el regalo más bonito que Dios me dio en estos 2 años, su amistad. Los quiero incondicionalmente, ustedes son mis hermanos también. Gracias por siempre estar en el lugar preciso y en el momento justo.

A tantas personas que han estado pendiente de mi desde el primer día y me han dado aliento y ánimo siempre. Ustedes son muy especiales en mi vida: José Armando, Orestes, Laciél, Yoandy, Vicente, Migue, Yohan, Ernestico, Osmel y todo un grupo cubanos que comparten junto conmigo, el sueño de luchar por un futuro mejor. Gracias por tanto a cambio de nada.

A Riki, 16 años de amistad y todo sigue como el primer día. Siempre has sido un ejemplo para mí, te siento como más que un hermano. Solo decirte que todas las personas debiesen tener un amigo como tú en sus vidas. Siempre fuiste el verdadero “FANTÁSTICO”.

A todos cuanto me ayudaron, a mi grupo de investigación, a mi familia del “norte”, a todos ustedes solo decirles: “GRACIAS, ¡MUCHAS GRACIAS!”.

## **DECLARACIÓN DE AUTENTICIDAD**

Este documento ha sido elaborado tomando como base los estándares y mejores prácticas internacionales, es fruto de mi propio trabajo y contiene información original; asimismo, en él se discute información previamente publicada por diversos autores. La información documental incluida en este trabajo forma parte del estado de arte y se cita debidamente, dando invariablemente crédito y reconocimiento a los autores originales.

A handwritten signature in black ink, consisting of stylized, overlapping loops and lines, positioned above a horizontal line.

**Ing. Jesús Javier Ortega Cabrera**

**Ciudad Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L. Enero, 2021.**



## CONTENIDOS

RESUMEN .....	4
ABSTRACT .....	5
CAPÍTULO I Introducción .....	6
Estado del Arte .....	9
2.1.    Componentes de las <i>headlamps</i> . .....	10
2.1.1.    Lentes .....	10
2.1.2.    Reflectores .....	11
2.1.3.    Fuentes de luz más utilizadas en las <i>headlamps</i> . .....	12
2.1.4.    Bezel .....	12
2.1.5.    Carcasa de soporte .....	13
2.2.    Metalización en capas delgadas de aluminio. ....	13
2.2.1.    Magnetron sputtering. ....	14
2.2.2.    Deposición térmica mediante <i>spray</i> . ....	16
2.3.    Mecanismos de crecimiento en películas delgadas. ....	17
2.4.    Modelos de zonas estructurales. ....	19
2.4.1.    Zona 1 .....	22
2.4.2.    Zona M.....	23
2.4.3.    Zona T.....	24
2.4.4.    Zona 2.....	24
2.4.5.    Zona 3.....	25
2.5.    Métodos de simulación computacional en el crecimiento de capas delgadas.....	25
2.5.1    Modelo de deposición balística. ....	26



2.5.2.	el Método Cinético de Monte Carlo ( <i>kMC</i> ) y el software NASCAM®	27
2.6.	Transferencia de calor y mecanismos de envejecimiento en recubrimientos de aluminio. ....	30
2.6.1.	Transferencia de calor en una capa delgada de aluminio. ....	30
2.6.2.	Características del recubrimiento protector en capas de aluminio.	32
HIPÓTESIS.....		33
OBJETIVOS.....		33
General .....		33
Específicos .....		33
Conclusiones del Capítulo I .....		34
CAPÍTULO II MATERIALES Y METODOLOGÍA.....		35
1.	El <i>software</i> NASCAM®.....	35
1.1.	El sustrato.....	36
1.1.1.	Definición del sustrato.....	37
1.2.	Parámetros de la deposición .....	38
1.2.1.	Configuración de la simulación. ....	40
1.3.	Herramientas virtuales del <i>software</i> NASCAM®.....	41
1.3.1.	Rugosidad.....	41
1.3.2.	Determinación de los parámetros ópticos del sistema. ....	43
2.	Diseño experimental desarrollado durante la investigación. ....	47
CAPÍTULO III RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....		50
1.	Estructura 3D de los recubrimientos para las diferentes condiciones experimentales. ....	50

2. Estudio sobre la influencia del espesor del sustrato sobre la reflectancia. .	53
3. Influencia de la velocidad de deposición (R) sobre la reflectancia. ....	55
4. Efecto del cambio de temperatura, en el sustrato, sobre la reflectancia. ...	57
5. Cambio en la reflectancia producto a la variación del ángulo de deposición.	60
6. Comportamiento de la rugosidad superficial, relación con el espesor del recubrimiento y su reflectancia. ....	63
7. Comportamiento de las constantes ópticas del sistema $n$ , $k$ en el intervalo comprendido entre los 300-1000 nm del espectro electromagnético.....	68
8. Determinación condiciones óptimas para obtener la máxima reflectancia en el rango del espectro visible. ....	70
CAPÍTULO IV CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES .....	72
Conclusiones .....	72
Recomendaciones .....	73
REFERENCIAS.....	74
ANEXO 1.....	80
Tablas de las rugosidades y espesores empleados en nuestro trabajo. ....	80

## RESUMEN

---

La mejora de las propiedades ópticas de un material, tales como la reflectancia, implica la compleja búsqueda de los parámetros experimentales óptimos en su proceso de obtención. La utilización de un software computacional para la simulación de estos procesos de crecimiento de capas delgadas representa un beneficio sustancial debido a la no dependencia de un sistema real, así como la posibilidad de explorar un mayor rango de magnitudes físicas involucradas. Además, existiendo la necesidad en la industria automotriz, *Varroc Lighting Systems*® se ha dado a la tarea de mejorar la reflectancia del aluminizado en sus faros, por ello llevamos a cabo el desarrollo, mediante el *software* NASCAM®, el cual utiliza el método cinético de Monte Carlo para desarrollar un modelo del sistema físico a estudiar en una escala nanométrica, este nos permitirá analizar la influencia de las diferentes magnitudes que pueden afectar la reflectancia del material. Para ello se desarrolló una metodología que contempla llevar a cabo la deposición del material a dos diferentes temperaturas del sustrato, también se modificaron los ángulos a los cuales se deposita el aluminio en su fase vapor mediante la técnica de *sputtering* y por último se varió en dos valores diferentes la velocidad a la cual los átomos de aluminio se depositan sobre el sustrato. Como resultado final se comprobó que las magnitudes como el ángulo de deposición, el espesor del recubrimiento y la velocidad a la cual se deposita el material influyen en la reflectancia, no así la temperatura del sustrato. Se obtuvo que para un ángulo de deposición de  $0^\circ$  y una razón de 0.404 nm/s para la deposición, la reflectancia fue máxima con un valor de 89.1%, para los 550 nm de longitud de onda en el rango del espectro visible. El espesor del recubrimiento donde se obtuvieron estos valores, fue el correspondiente al intervalo de los 80 nm. También se pudo comprobar ciertas relaciones existentes entre la rugosidad y el espesor de la muestra, así como el aumento de la reflectancia, a medida que espesor del recubrimiento aumentaba, hasta alcanzar un máximo en el intervalo antes mencionado.

## ABSTRACT

---

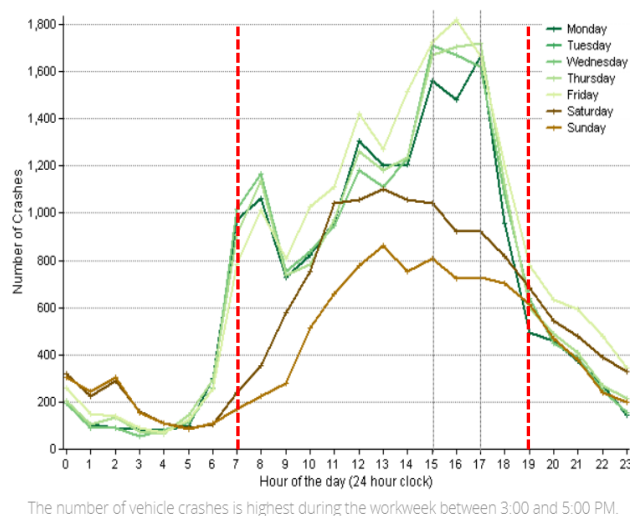
Improving the optical properties of a material, such as reflectance, involves the complex search for the optimal experimental parameters in its production process. The use of computer software for the simulation of these thin layer growth processes represents a substantial benefit due to the non-dependence on a real system, as well as the possibility of exploring a greater range of physical quantities involved. In addition, there being a need in the automotive industry, Varroc Lighting Systems© has taken on the task of improving the reflectance of the aluminized in its headlights, for this reason we carry out the development, using the NASCAM® software, which uses the kinetic method of Monte Carlo to develop a model of the physical system to study on a nanometric scale, this will allow us to analyze the influence of different magnitudes that can affect the reflectance of the material. For this, a methodology was developed that contemplates carrying out the deposition of the material at two different temperatures of the substrate, the angles at which the aluminum is deposited in its vapor phase were also modified by means of the sputtering technique and finally it was varied in two different values are the speed at which the aluminum atoms are deposited on the substrate. As a final result, it was found that magnitudes such as the deposition angle, the thickness of the coating and the speed at which the material is deposited influence reflectance, but not the temperature of the substrate. It was obtained that for a deposition angle of  $0^\circ$  and a ratio of 0.404 nm/s for the deposition, the reflectance was maximum with a value of 89.1%, for the 550 nm wavelength in the range of the visible spectrum. The thickness of the coating where these values were obtained, was the one corresponding to the 80 nm interval. It was also possible to verify certain relationships between the roughness and the thickness of the sample, as well as the increase in reflectance, as the thickness of the coating increased, until reaching a maximum in the aforementioned interval.

## CAPÍTULO I

### Introducción

El sitio web oficial de la Organización Mundial de la Salud [1] (OMS por sus siglas en inglés) reporta que aproximadamente 1.35 millones de personas pierden su vida cada año como resultado de un accidente de tránsito. Entre 20 y 50 millones más de personas sufren lesiones no fatales, y muchas de ellas sufren una discapacidad permanente como resultado de su lesión. En este informe se muestra que los accidentes de tránsito le cuestan a la mayoría de los países el 3% de su producto interno bruto.

La compañía ArcGIS, empresa líder en el análisis de datos a gran escala, posee un sitio web [2] especializado en el monitoreo de accidentes de tránsito a nivel mundial en que se muestra la relación entre incidencia de accidentes en función de la hora del día para cada día de la semana, como se muestra en la **Figura 1**. Relación entre el número de accidentes y la hora durante el día a la cual ocurren, ArcGIS [2].



**Figura 1.** Relación entre el número de accidentes y la hora durante el día a la cual ocurren, ArcGIS [2].

Como se aprecia en la **Figura 1** la mayor cantidad de accidentes ocurre durante el horario de las 15:00 y 17:00 horas del día, y es en gran medida debido al alto flujo vehicular que circula por las vías en ese intervalo de tiempo. Correspondiendo el 40% del total de los siniestros ocurridos al horario nocturno. Dewar *et col.* informan en [3] que existe una mayor correlación entre el índice de mortalidad de los accidentes que ocurren en el horario nocturno, y expone los factores que más influyen mediante la recopilación de datos reales. En este trabajo se resalta el papel fundamental que posee la visibilidad que pueda alcanzar el conductor en diferentes condiciones ambientales. Aunque este tipo de trabajos posee sus inicios en [4] donde se analizó el efecto que poseía sobre el conductor las fluctuaciones del alumbrado del auto, ya sea por la intermitencia de luces de otro auto sobre él o por la escasa iluminación, estos efectos fueron negativos e impactaban la salud desde el punto de vista neurológico pudiendo llegar a desencadenar en un accidente .

De ahí es que se deriva la necesidad de desarrollar sistemas de iluminación que sean más eficientes e inteligentes, en cuanto alumbrar la superficie por la cual se va a transitar y además sea capaz de discriminar la presencia de objetos u otros vehículos de una manera fluida, que no afecte bruscamente la concentración que requiere el acto de conducir.

Dentro de este ámbito está la necesidad de mejorar los diseños para que sean cada vez más óptimos y eficientes, encontrar fuentes de luz más potente y construir sistemas electrónicos que sean capaces de lograr el control automático de estas luces, así como de entregar la potencia eléctrica que estas fuentes luminosas requieran. En todo este marco, la fabricación de las *headlamps* (lámparas frontales, sería la traducción más acertada al español) es fundamental que los sistemas de fabricación sean también eficientes, rápidos y de alta calidad, todo esto supone aún en nuestros días un reto científico-tecnológico.

Un punto relevante es también el tiempo de trabajo de los faros, que aunque su demanda es solo el 25% del día [5], su análisis en cuanto al consumo de energía adicional o el costo operativo de los faros es vital. Por ejemplo, se gastan aproximadamente 55 mil millones de litros de gasolina y diésel o 66 mil millones de

dólares anuales como media en el funcionamiento del faro [6]. Según reporta el departamento de Energía de los E.E.U.U [7], la eficiencia de conversión de potencia eléctrica a óptica varía según las luminarias que se vayan a emplear, los diodos emisores de luz (LED, por sus siglas en inglés) poseen hasta un 30%, y se pretende que estos superen el 50% en los próximos años, mientras que la eficiencia de las tradicionales es solo del 5% para halógeno o 20% para xenón respectivamente. Si los faros LED pueden reemplazar a todos los tradicionales, el automóvil minimizará el consumo de combustible para la iluminación del automóvil al 10% y reducirá las emisiones de CO<sub>2</sub> en aproximadamente de 1 a 3 g/km que recorra el auto según se reporta en [8].

Es por ello que surge nuestro tema de investigación, como parte de una colaboración con una de las empresas líderes en este mercado: *Varroc Lighting Systems*®, encargada con la manufactura de todos los dispositivos que componen las *headlamps*. Esta empresa presentó problemas con la etapa del aluminizado de la superficie de origen polimérico en la que los valores esperados de reflectancia disminuyeron, dando paso así a la necesidad de investigar para no solo resolver el problema sino mejorar parámetros en la fabricación, con una base científica, que permitiese incrementar los valores de reflectancia para los recubrimientos allí realizados.

En nuestro estudio se procedió a la simulación, mediante el método de Monte Carlo Cinético, de la deposición de capas delgadas de aluminio sobre óxido de silicio, variando parámetros que intervienen como la temperatura del sustrato, el ángulo de deposición y la razón de deposición, con el fin de establecer la validación del *software* NASCAM para el estudio de la reflectancia en estas capas y analizar el comportamiento de la reflectancia final de la superficie. Esta investigación persigue sentar las bases de la comprensión de los fenómenos que se relacionan durante el aluminizado en una escala nanométrica.

En esta investigación se persiguió además brindar información novedosa sobre un tema muy poco abordado en la literatura, como se menciona en [9], el estudio de propiedades ópticas de capas delgadas de aluminio, del cual hasta el momento es

escasa la información desde el enfoque que perseguimos en una escala nanométrica.

## **Estado del Arte**

Los faros delanteros de los autos de pasajeros suelen estar unidos al frente de las defensas para proporcionar una visión adecuada del camino por el cual se va a transitar; desde los comienzos de la era automovilística, en el año 1896 ya eran colocados en esa posición [10]. La apariencia del automóvil de pasajeros se caracteriza fundamentalmente por los aspectos aerodinámicos y de estilo contemporáneo, los faros juegan un papel importante en la concepción moderna sobre el diseño final. Una condición esencial para satisfacer las demandas actuales es que los faros delanteros deben estar totalmente integrados con el contorno de la carrocería del automóvil [10, 11]. Esta tendencia de estilo existe en el mercado de automóviles de pasajeros desde el año 1945.

El papel fundamental de estos dispositivos de iluminación en un vehículo, es el de brindar una contribución a la seguridad en las carreteras por las que se circule desde el aspecto de la visibilidad [12]. Por lo tanto, los fabricantes de automóviles de pasajeros deben seguir estrictamente los requisitos reglamentarios, las normas de calidad establecidas para ello [13-15]. Además de estar sujetos a normas de diseño y operación nacionales e internacionales que rigen tanto los procesos de fabricación como los procedimientos de prueba [16-18]. En la actualidad como parte de la evolución que vive la sociedad, los requisitos en el ámbito de la tecnología de iluminación se están ajustando a las diversas demandas estilísticas [19].

La búsqueda en la optimización y aumento de la eficiencia de la reflectancia en las *headlamps* es un área que abarca muchas disciplinas de la ingeniería, por ello cada vez más las empresas buscan integrar y capacitar personas con conocimientos en varias áreas de las ciencias ingenieriles que puedan brindar información valiosa respecto al continuo proceso de mejora en las *headlamps* de manera general.



## **2.1. Componentes de las *headlamps*.**

Las *headlamps* están conformadas por varias estructuras que son las encargadas desde proveer el soporte o la fortaleza mecánica necesaria, hasta incrementar la eficiencia de la luz emitida por la fuente luminosa empleada en el sistema. A continuación, se dará una descripción de los elementos fundamentales de la misma.

### **2.1.1. Lentes**

En los faros modernos, la distribución de iluminación requerida en la carretera es solo función del reflector, donde la antigua lente dispersora de los haces del vidrio transparente, ahora solo protege el interior del faro contra las influencias externas. Esta lente constituye la superficie exterior del faro que tiene un papel importante en el diseño del automóvil de pasajeros. Es una superficie transparente o translúcida que encierra la fuente de luz y permite cumplir con los requisitos fotométricos y calorimétricos. La lente se utiliza para filtrar colores no deseados de la luz blanca emitida por el reflector. Para la aplicación de luz antiniebla o luz de señal, se puede usar una lente teñida [20].

Las lentes convencionales se fabrican de vidrio, con ciertos contornos en él por lo general de carácter decorativo. Los automóviles modernos usan lentes transparentes en su mayoría hechos de plástico debido a su peso liviano y sus ventajas de costo [20]. El material para lentes tiene resistencia al calor, buenas propiedades ópticas, durabilidad y facilidad de fabricación. En la mayoría de las aplicaciones de faros se utiliza policarbonato como material para lentes. El policarbonato estándar puede soportar una temperatura de hasta 130 °C, mientras que el policarbonato de alta temperatura puede soportar hasta 180 °C [21]. Normalmente, la lente se fabrica mediante un proceso de moldeo por inyección seguido de un recubrimiento para proteger la superficie del envejecimiento y los arañazos. El material estándar para lentes se da en los estándares SAE J576 [22]. La lente normalmente está unida adhesivamente al conjunto del faro.

### **2.1.2. Reflectores**

El objetivo del reflector es recoger la mayor cantidad de luz posible proveniente de la fuente emisora, para lograr que el alcance del haz sea máximo. La forma de los reflectores en los inicios del siglo XX fue una superficie paraboloide. La tecnología del reflector moderno consiste en una variedad de configuraciones, como reflectores escalonados o reflectores de forma libre basados en tecnología de imagen óptica, como el sistema poli-elíptico [8]. El reflector parabólico produce un haz paralelo de luz reflejada si la fuente de luz se encuentra en el foco.

La eficiencia de un reflector está relacionada con su factor de reflexión, este viene dado por el material que entra en contacto directo con la luz emitida por el emisor, a grandes rasgos esta eficiencia es la relación entre la intensidad que llega a la superficie y la que es reflejada. En la actualidad el reflector se recubre con aluminio (Al) mediante un proceso físico de deposición en fase vapor y la creación de una capa delgada sobre el material del cual se vaya a construir el faro [22], mediante este método se logran valores para el coeficiente de reflexión que rondan la vecindad del 85% en el caso del rango del espectro visible [23], aunque en ese mismo estudio se reporta un máximo de reflectancia de 96% en capas delgadas de aluminio pero para luz correspondiente al rango del infrarrojo del espectro electromagnético. La superficie del reflector debe mantenerse limpia y libre de corrosión y descamación. La forma del reflector parabólico depende en gran medida de la profundidad focal del reflector.

Las propiedades que posee el aluminio lo han llevado a jugar un papel irremplazable y creciente en muchas áreas de la tecnología, que son exigentes y de rápido desarrollo actual, especialmente en la electrónica, en áreas de la fabricación de contactos óhmicos, además de poseer amplia aplicaciones en los recubrimientos utilizados en las industrias ópticas [24], como capa reflectante. Respecto a sus bondades en el momento de depositar y sus características ópticas, está bien estudiado en la literatura que el aluminio se adhiere bien al silicio y al dióxido de silicio [24, 25] presentando además coeficientes de reflexión elevados, alrededor del 91% obtenido teóricamente, como dato importante se reporta que la temperatura

de fusión del Al puro es de 660.4°C y la de ebullición de 1390°C [24]. Sin embargo, no se han encontrado trabajos que aborden ampliamente el mismo tema sobre sustratos poliméricos.

Respecto a los reflectores con profundidad focal más corta, estos mejoran en mayor medida la reflectancia de la luz emitida y alcanzan niveles de alta eficiencia. Pero el bajo valor de la profundidad focal reduce la apertura del reflector. El valor de la distancia focal del reflector convencional está dentro del rango de 15 - 40 mm [26].

El reflector se fabrica mediante moldeo por deformación profunda seguido de un proceso de galvanizado o recubrimiento en polvo. Luego se pinta el reflector para producir una superficie lisa; la sustancia con que se recubre es un siloxano, un polímero rico en óxido de silicio, después de lo cual se deposita la capa reflectante de aluminio antes mencionada. Los reflectores de plástico se fabrican mediante moldeo por inyección o proceso de moldeo por compresión seguido de un revestimiento de la capa reflectante [26].

### **2.1.3. Fuentes de luz más utilizadas en las *headlamps*.**

Como fue comentado anteriormente, los fabricantes de faros utilizan fuentes de luz estándar de acuerdo con los requisitos de iluminación de los mercados, que varían desde normas americanas hasta europeas [27]. A medida que la ciencia y la tecnología han avanzado, las fuentes de los faros han ido evolucionando y han recorrido etapas que abarcan desde las lámparas incandescentes, las lámparas halógenas, los tubos de descarga de alta intensidad y las últimas tecnologías de diodos emisores de luz (LED).

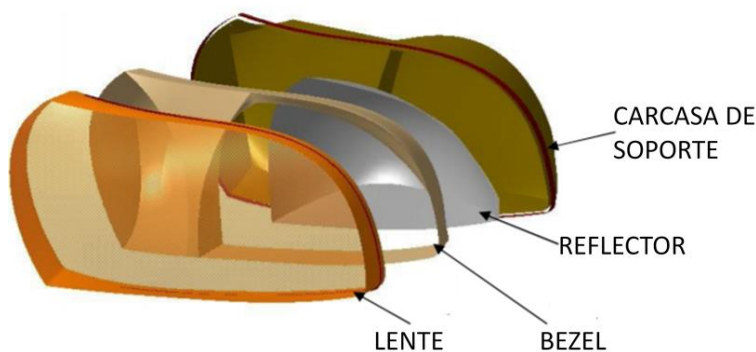
### **2.1.4. Bezel**

El bezel no es un componente principal de los faros. Sin embargo, tiene un papel importante en el funcionamiento del reflector. En algunos diseños, el bezel está recubierto con una capa reflectante y actúa como un reflector secundario. El reflector está anclado a la carcasa del faro mediante tornillos ajustables y debe poder moverse libremente (ajuste vertical) para apuntar. Este actúa como un "espaciador" entre el reflector y la lente con cierto valor estético. Generalmente se

sujeta en los extremos de la lente permitiendo el desmontaje para mantenimiento e inspección [20].

### 2.1.5. Carcasa de soporte

La carcasa proporciona estructura mecánica para montar todos los componentes de los faros. La lente está sellada herméticamente a la carcasa con adhesivos. La carcasa incluye un plano de referencia para montar las fuentes de luz y a los reflectores que mantienen distancias de trabajo relativas entre ellos. El reflector se atornilla al soporte de la carcasa mediante tornillos ajustables, mientras que el portalámparas se fija en el soporte asegurando que al dispositivo emisor. En la **Figura 2** podemos apreciar un esquema del montaje aquí descrito, la fuente de luz no se observa en la **Figura 2**. Esquema de partes y componentes del sistema óptico en las *headlamps*.



**Figura 2.** Esquema de partes y componentes del sistema óptico en las *headlamps*.

## 2.2. Metalización en capas delgadas de aluminio.

Actualmente el aluminio ha sido estudiado como material reflectante por su alta reflectancia en el visible e infrarrojo del espectro. Además, el aluminio tiene una similar resistencia a la corrosión que la plata y es relativamente más económico [28]. En ese sentido, se han desarrollado reflectores de aluminio ya sea como primera y segunda superficie, utilizando materiales poliméricos como sustratos para reemplazar las tradicionales vidrios pesados, frágiles y caros [29]. Para hacer estos recubrimientos existen muchas técnicas de deposición las cuales hacen posible el proceso [30]. En general pueden ser agrupadas en dos familias, las técnicas de

deposición física y las químicas. Siendo estas últimas las menos utilizadas puesto que emplean el uso de solventes orgánicos que por lo general son muy tóxicos como es en el caso de la hidracina [30]. El uso de procesos de deposición física mediante vapor son los más empleados en la metalización del aluminio, para la fabricación de capas delgadas, aquí se incluyen las aplicaciones ópticas, recubrimientos reflectantes y antirreflejantes, películas birrefringentes y polarizadas, películas hidrófobas y en la manufactura de micro lentes [31]. Con un marcado aumento en el uso de dispositivos ópticos para aplicaciones militares y comerciales. Entre ellos los más comunes son sublimación por haz de electrones, *Magnetron sputtering*, deposición térmica mediante *spray* y sublimación al vacío [29]. Una de las más utilizadas es la última técnica antes mencionada, ha sido ampliamente estudiada desde hace muchos años como una técnica eficiente para obtener espejos de aluminio polimérico. Sin embargo, los factores críticos aún están bajo investigación, como por qué posee baja compatibilidad superficial y adherencia cuando se trabaja con una junta tipo polímero-metal, depositada en películas y como varía la homogeneidad y el comportamiento en cuanto reflexión de la luz refiere [29].

### **2.2.1. Magnetron sputtering.**

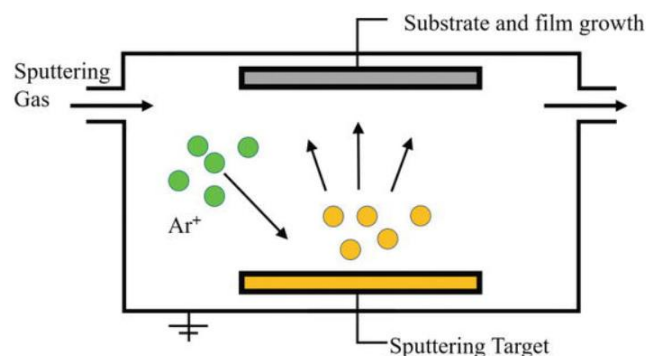
La deposición mediante *sputtering* es un método de deposición física de vapor (PVD, por sus siglas en inglés) mediante el cual se deposita una película delgada por pulverización catódica [32]. El método general de pulverización catódica se puede utilizar para preparar una variedad de materiales como metales, semiconductores o aislantes y tiene las ventajas de ser un equipo relativamente simple de operar, un control del espesor de deposición preciso, un área de recubrimiento grande y que las partículas depositada presentan una fuerte adhesión con el sustrato, otro método es el de bombardeo magnético desarrollado en la década de 1970, donde las partículas alcanzan una alta velocidad, baja temperatura y no son muy dañadas durante el proceso de deposición [33].

Hoy en día, es uno de los procesos clave para la fabricación de productos innovadores, como todo tipo de discos para almacenamiento de datos y

entretenimiento, pantallas planas, ventanas inteligentes o celdas solares de película delgada.

En la deposición mediante *Magnetron sputtering* se utiliza un plasma que está limitando la superficie a la cual se va a depositar el material precursor, este plasma, típicamente es generado usando un gas inerte (son conocido como gas *sputter*). Los átomos neutros e iones con carga diferente se aceleran hacia el sustrato, mediante un gradiente de campo eléctrico y en presencia de un campo magnético uniforme paralelo a la superficie [34] objetivo. Los átomos típicamente adquieren energías de varias decenas de eV.

La longitud media del camino libre de los átomos está determinada por la presión del gas del pulverizador y, por lo general, es más pequeña que la distancia objetivo al sustrato. Esta media del camino libre determina el número de colisiones de los átomos metálicos con el gas pulverizador y, por lo tanto, la energía de los átomos al llegar al sustrato. Por lo tanto, los parámetros del proceso pueden usarse para optimizar el crecimiento para obtener capas lisas y densas. *Magnetron sputtering* es un proceso muy estable que permite depositar estructuras en capas, como espejos multicapa, con alta precisión en periodicidad y alta pureza. Un sesgo de sustrato también se puede utilizar para atraer iones del plasma [34]. En la **Figura 3** se hace referencia a un esquema de un equipo de *Magnetron sputtering*.

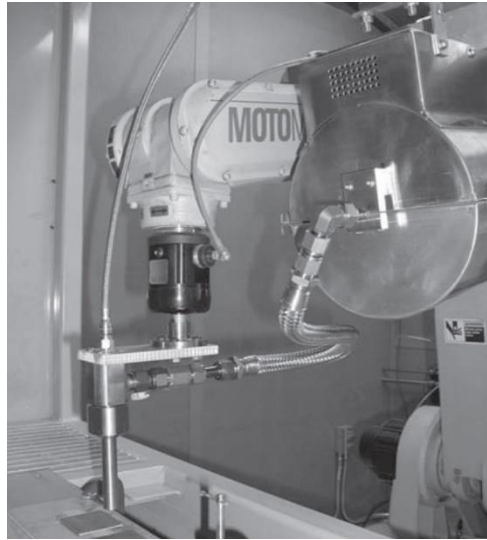


**Figura 3.**Esquema de un sistema de *Magnetron sputtering* tomado de [34].

### 2.2.2. Deposición térmica mediante *spray*.

Este método se basa en la pulverización térmica, en el que se deposita un material en estado sólido sobre una superficie. Las partículas que componen el polvo precursor se aceleran en una corriente de gas calentado y presurizado a través de una boquilla e impactan sobre el sustrato. La capacidad de formación del recubrimiento está relacionada con la velocidad de las partículas que conforman el polvo. Cada material de recubrimiento utilizado puede definirse por una velocidad crítica,  $v_{cr}$ , por encima de la cual las partículas se deforman de manera suficientemente plástica para que se adhieran al sustrato, formando un recubrimiento. Debajo del  $v_{cr}$ , se produce principalmente erosión y rebote de partículas [35]. Esta técnica posee una variante llamada "spray en frío" (*cold spray*, *en inglés*) que se utiliza para describir este proceso a bajas temperaturas ( $-100$  a  $+100^{\circ}\text{C}$ ). En la **Figura 4** se observa una instalación típica de esta técnica, tomada de [36].

Los recubrimientos obtenidos mediante esta técnica son densos y de baja porosidad, especialmente cuando se depositaban en varias capas [37]. En ocasiones es necesaria una capa intermedia delgada entre el sustrato y el recubrimiento, un ejemplo es la aplicación de capas intermedias de estaño y partículas esféricas de cobre, estas permiten que en las capas de aluminio se favorezcan a la creación de un recubrimientos gruesos sobre policloruro de vinilo (PVC) [38]. Otro caso es el de los recubrimientos dobles de aluminio y cobre, donde cobre causa la compactación del aluminio, reduciendo así la porosidad de la capa creada [35].

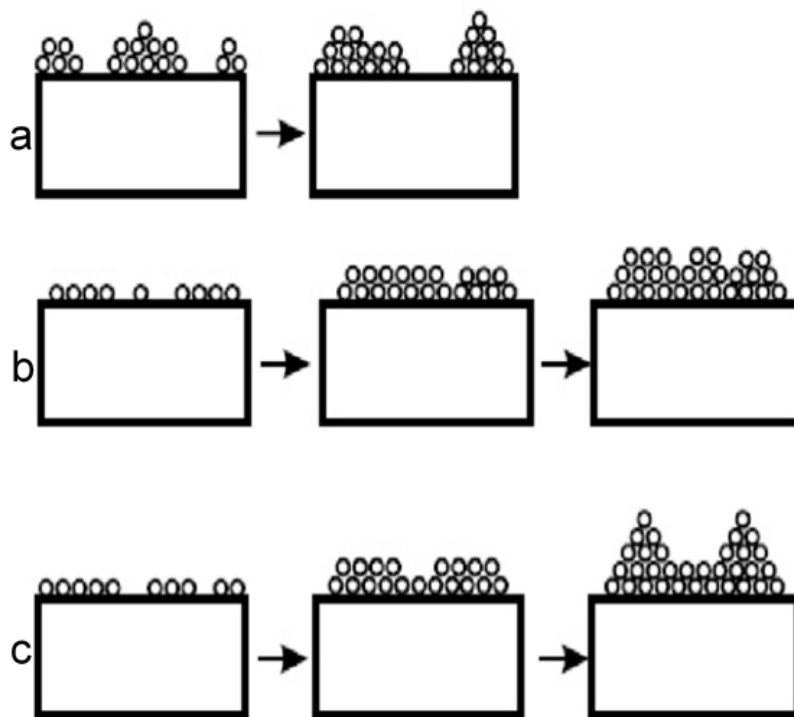


**Figura 4.** Equipo comercial de un *Cold Spray* tomado de [36].

### **2.3. Mecanismos de crecimiento en películas delgadas.**

Existen tres mecanismos que explican cómo ocurre el proceso de deposición en las capas delgadas [39], cuyos esquemas se presentan en la **Figura 5**.





**Figura 5.** Mecanismos de crecimiento. a) Volmer-Weber, b) Frank Van der Merwe, c) Stranski-Krastanov tomado de [39].

Estos mecanismos de nucleación dependen de la naturaleza de la interacción entre los átomos depositados y el material del sustrato. En la **Figura 5** apartado **a)** se observa un modelo de crecimiento en islas ó crecimiento tipo Volmer-Weber [40], este es favorable cuando los átomos incidentes en la superficie son fuertemente atraídos entre sí, más que por los átomos del sustrato. Debido por lo general a una baja energía superficial, los átomos adsorbidos difunden fácilmente a lo largo del sustrato, pero es mayor la probabilidad de interactuar con otros átomos, formando islas, o se re-evaporan. Las islas crecen en ancho y espesor, eventualmente coalescen con otras islas cercanas. Los huecos que se van originando producto de esta formación en las películas sirven como centros de nucleación secundarios, y son rellenados para formar una película continua. Este tipo de crecimiento es característico en un sistema de metal sobre un aislante [40].

En el apartado **b)** de la **Figura 5** se muestra un crecimiento en 2D [40] (capa por capa o crecimiento del tipo Frank Van der Merwe). En esta ocasión los átomos de la película son más fuertemente atraídos al sustrato que por átomos incidentes, este tipo de crecimiento ocurre cuando se tiene bajas densidades de defectos interfaciales o superficiales. Existe un buen acoplamiento atómico en la interfase sustrato-película que conlleva a una fuerte afinidad entre los átomos de la película y el sustrato. Este crecimiento se lleva a cabo en sistemas metal-metal o cuando la película crece sobre un sustrato limpio del mismo material, por lo general [40].

La tercera forma, apartado **c)** de la **Figura 5**, ocurre como una combinación de los modos de crecimiento previamente mencionados. Este modo es conocido por el nombre Stranski-Krastanov [39, 40], aquí se forma una monocapa continua mediante crecimiento epitaxial, que es precedida y seguida por islas. Se atribuye a una anomalía en la energía de la película y el sustrato [40], posiblemente debido a un aumento de esfuerzos en la superficie, esto puede provocar como resultado un desajuste de los modos fonónicos superficiales de la red cristalina del sustrato [40]. El aumento de esfuerzos origina defectos al formarse la película, de tal modo que actúan como sitios de nucleación heterogénea al formar dichas islas. Esta manera de crecimiento es vista en sistemas de metal-metal y metal-semiconductor [39].

Los mecanismos de crecimiento de la película afectan directamente la morfología final de la película y la microestructura. La morfología es importante debido a que esta se encuentra relacionada a las propiedades físicas y químicas del material. La morfología y topografía superficial son afectadas por la rugosidad superficial del material, temperatura del sustrato y presión de deposición. Los modelos de zonas estructurales propuestos por Movchan y Demchisin, Thornton y Messier [39] describen el potencial de las morfologías de las películas delgadas, ya sea convencional o asistida por iones.

#### **2.4. Modelos de zonas estructurales.**

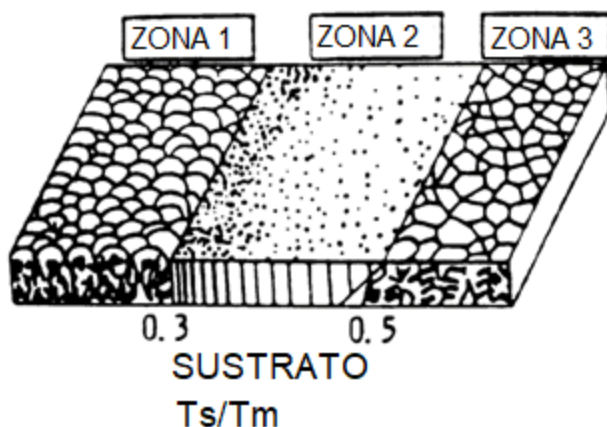
Las películas delgadas exhiben una amplia variedad de microestructuras caracterizadas en términos de tamaño de grano, orientación cristalográfica, defectos en la red, composición de fases y morfología de la superficie. La demanda

industrial de temperaturas de procesamiento cada vez más bajas en la fabricación de dispositivos y productos significa que las capas a menudo se depositan a temperaturas en los sustratos ( $T_s$ ) menores, en relación al 0.1-0.3, a la temperatura de fusión ( $T_m$ ), en escalas de temperatura absoluta [39].

Por lo tanto, la síntesis de capas delgadas generalmente tiene lugar lejos del equilibrio termodinámico. Como consecuencia, la microestructura durante la deposición generalmente evoluciona de manera competitiva y las limitaciones cinéticas inducidas por el crecimiento a baja temperatura permiten que la síntesis sea controlada, mediante fases metaestables y estructuras artificiales, como materiales multicapa [39].

Como parte de la comprensión en la formación de las capas, es conocida la posibilidad de realizar ingeniería microestructural y nanoestructural, con el fin de diseñar un material para aplicaciones tecnológicas específicas [39-41]. Esto ha llevado al desarrollo y perfeccionamiento de un modelo que prediga el comportamiento de estas estructuras teniendo como variables  $T_s$ ,  $T_m$  y las presiones relativas a los materiales implicados en el crecimiento. Este modelo es conocido por Modelos de Zonas Estructurales (SZMs, por sus siglas del inglés). Estos modelos clasifican sistemáticamente, la evolución estructural auto-organizada durante la deposición física en fase vapor, en función del crecimiento de la capa delgada y sus parámetros característicos [40-42].

Este modelos tiene sus inicios en [41] en donde Thornton *et. al*, se dieron a la tarea de observar la evolución microestructural de Ti, Ni, W,  $ZrO_2$  y  $Al_2O_3$  empleados en recubrimientos, que eran depositados por PVD. Ellos representaron un solo diagrama para cada elemento en el cual se apreciaba el espesor de las capas, la relación entre las temperaturas  $T_s/T_m$  y la microestructura observada a cada rango de temperatura [41], en la **Figura 6** .



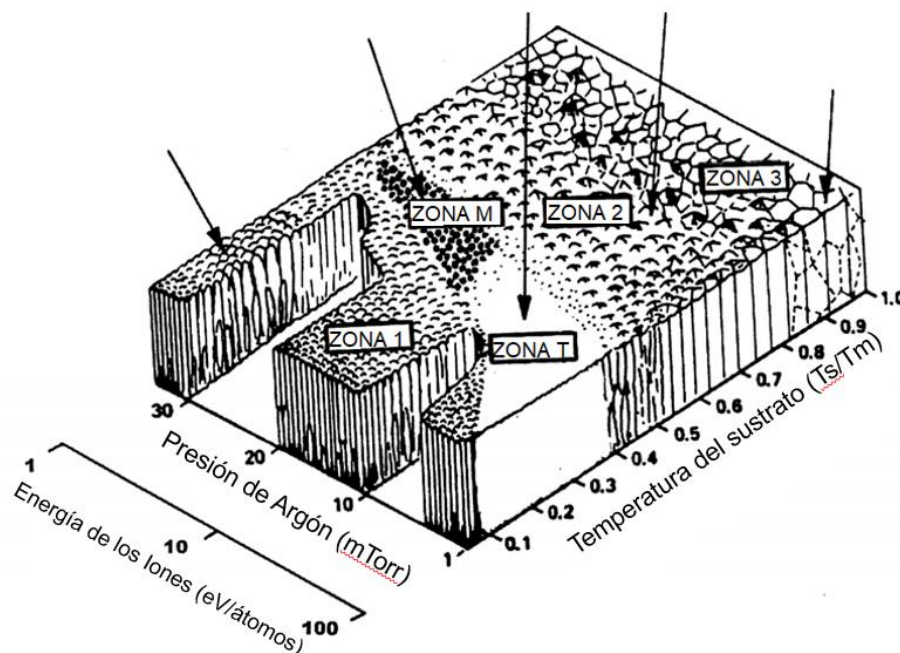
**Figura 6.** Modelo de zonas, diseñado por Thornton tomado de [41].

El trabajo fue llevado a cabo mediante el estudio *in situ* de microscopía electrónica de barrido y microscopía de sondeo superficial (SPM por sus siglas en inglés).

Thornton *et al.*, en el año 1977, añade otro eje al diagrama *SZM*, el cual toma en cuenta los cambios en la presión del gas que ocurren al depositar mediante la técnica de erosión catódica, así como otra zona, conocida como zona T, esta ocurre entre la zona 1 y zona 2. Messier *et al.* [43], corrigen el modelo de zona propuesto por Thornton al tomar en cuenta la energía cinética media de los átomos depositados y la evaluación del crecimiento de la morfología. También agregó otra zona y la llamó zona M.

Con el establecimiento de las zonas 1, M, T, 2, y 3, se logra definir de manera exacta la topografía superficial que muestran las películas depositadas por técnicas de deposición física. Messier en [43] demostró que a pesar de que estas zonas representan visualmente distintas zonas, como se puede ver en la **Figura 7**, las zonas representan un continuo de morfologías con límites o fronteras distinguibles. Aunque la mayoría de los trabajos pioneros de *SZM* se han hecho con metales

policristalinos, también es aplicable a películas amorfas semiconductoras y a películas cerámicas amorfas y cristalinas [43].



**Figura 7.** Modelos de zonas estructurales según Messier [43].

#### 2.4.1. Zona 1

La morfología de la zona 1 es producida debido a la baja movilidad de átomos adsorbidos. La baja movilidad de átomos se origina por varias razones: una es porque  $T_s/T_m$  es menos que 0.3, también puede suceder cuando es nulo el bombardeo de iones o es muy poco o que la energía de bombardeo sea baja (entre 5 y 25 eV), dependiendo del material a depositar y el modo de bombardeo [44] empleado. Otro factor que influye en la formación de esta morfología es la rugosidad del sustrato, ya que la nucleación ocurre preferentemente sobre imperfecciones [45]. Durante el estado inicial de crecimiento la baja movilidad da como resultado el agrupamiento de átomos (*clusters*) a escala nanométrica. Dichos *clusters* tiene un tamaño entre 1 y 3 nm; por lo tanto, la longitud de difusión no excede estos valores [44]. Las diferencias en el tamaño de estos *clusters* ocasionan variaciones en la captura de átomos depositados posteriormente [46]. Los *clusters* incrementan su tamaño conforme son capturados más átomos y arreglos más grandes forman conglomerados al depositarse *clusters* de menor tamaño. Esto conduce a una

competencia de crecimiento columnar. La expansión de las columnas dominantes se propicia cuando los átomos de las orillas sobresalientes tienen un radio de captura que se extiende más allá de la frontera perimetral *clusters*-columna; por lo tanto, las columnas más altas tienen más probabilidad de expandirse dando como resultado un ocultamiento de las columnas adyacentes impidiendo su crecimiento hasta cesarlo. La película tiene una morfología superficial en forma de columnas que disminuyen su radio paulatinamente de abajo hacia arriba y la punta en forma de cúpula las cuales se caracterizan por granos columnares con fronteras abiertas [46]. Las películas son amorfas o nano-cristalinas de granos pequeños e equiaxiados. Este tipo de morfología tiene pobres propiedades mecánicas debido a su fracción porosa (5-15 %) entre las fronteras columnares.

#### **2.4.2. Zona M**

Roy, en el año 1985, reportó esta morfología en forma de cerillo entre la zona 1 y la zona T. Determinando que esta morfología era diferente de las otras dos zonas [47]. En 1992 García-Ruiz *et al.* reportaron que esta forma de crecimiento resulta del cese de la competencia de crecimiento [48], después de un micrómetro, creando columnas verticales en cada lado de ellas. En el año 2001, Messier *et al.* incluyen este tipo de morfología al SZM y la nombra zona M. esta morfología ocurre bajo condiciones de bombardeo de iones moderados (10 a 30 eV/átomo) y altas presiones de gas ( $1.5$  a  $3.0 \times 10^{-2}$  Torr) a una relación de  $T_s/T_m$  aproximadamente de 0.35 a 0.45 [49].

El crecimiento de esta morfología empieza en modo de competencia, pero cambia a un modo no competitivo, sin cambiar los parámetros de deposición [50]. Inicialmente la superficie de la película es plana, pero se hace rugosa al formarse *clusters* y ocurre el proceso de competición. Este cambio en la rugosidad afectará el crecimiento de las columnas (*self-shadowing*) y la re-deposición de átomos [46]. Al ser la superficie más rugosa la deposición aumenta al concentrarse el ángulo de incidencia de los átomos entrantes en las orillas de las columnas. Sin embargo, los átomos en las orillas son preferentemente re-depositados en el área que forman las fronteras de las columnas. Debido a la baja energía y al cambio en el ángulo de

incidencia durante la re-deposición, las áreas de fronteras entre las columnas son menos densas. Este proceso produce un crecimiento constante de las columnas [51]. La morfología final consiste en columnas paralelas con puntas en forma de domos [46].

### **2.4.3. Zona T**

Thornton, en 1977, describe la zona T como la morfología de transición entre las zonas 1 y 2 [42]. Esta se extiende en el régimen de Movchan y Demchisin por la baja movilidad inducida térmicamente a  $T_s/T_m$  entre 0.1 y 0.4 de SZM original, pero manteniéndose dentro del régimen de erosión catódica a bajas presiones de gas ( $1$  a  $15 \times 10^{-5}$  Torr) y se observa a lo largo del segundo eje sobrepuesto por Thornton sobre el SZM original [42]. Messier y colaboradores comprobaron el efecto que tenía la energía de iones normalizada respecto al arribo de un solo átomo en la formación de la zona T, encontraron que esta morfología generalmente ocurre con energías de bombardeo de iones más grandes que 20 a 25 eV, pero normalmente de 70 a 100 eV/átomo. Lo cual coincide con más bajas presiones de gas [44, 47]. Como el caso de la Zona 1, el agrupamiento de átomos ocurre a una escala entre 1 a 3 nm, pero no ocurre una evolución de la película más allá de este agrupamiento. Análisis mediante SEM y AFM muestran que el crecimiento de competición, vistos en la Zona 1, es inhibida por la movilidad inducida con el bombardeo de iones [43]. Simulaciones de dinámica molecular sobre la movilidad inducida por bombardeo de iones, demuestran que aparece erosión en la superficie de la capa, esta se puede interpretar como vacancias superficiales de átomos que la componen, para disminuir la baja densidad en regiones huecas originadas a condiciones de baja movilidad [44]. La morfología de esta zona contiene granos más finos y más defectos que la Zona 1, lo que le da una apariencia como de fibras [9, 44].

### **2.4.4. Zona 2**

Para formar esta morfología se requieren valores de  $T_s/T_m$  de 0.3 a 0.6 [44] a diferencia de la Zona 1, T y M, la presión de gas de erosión catódica tiene poco efecto sobre estas películas procesadas a altas temperaturas. Una alta difusión de átomos adsorbidos en la superficie elimina el efecto de ocultamiento vistos en la

zona 1 y M, da como resultado que la Zona 2 sea columnar, más suave, y grande que la de las Zonas 1 y T [45].

Las columnas son totalmente densas, paralelas, con granos orientados y superficies facetadas, dichas columnas están separadas por fronteras de grano intersticiales [50] esta morfología tiene buena resistencia mecánica [40, 45].

#### **2.4.5. Zona 3**

Este tipo de películas son dominadas por difusión de volumen, lo cual conduce a una baja densidad de defectos [45]. La relación de  $T_s/T_m$  es más grande o igual a 0.5, a temperaturas de sustrato altas. Como en las películas de la zona 2, la presión no tiene efecto sobre películas producidas a altas temperaturas. Los granos columnares recrystalizan para formar granos equiaxiales [40, 45]. Esta morfología provee una excelente resistencia mecánica.

### **2.5. Métodos de simulación computacional en el crecimiento de capas delgadas.**

Las simulaciones numéricas computacionales sobre crecimiento de capas delgadas han atraído la atención de muchos investigadores en las últimas décadas [52-55]. Estas se pueden usar para reemplazar la solución analítica de ecuaciones teóricas y así proporcionar una mejor comprensión del mecanismo de crecimiento. Muchos parámetros y efectos importantes pueden obtenerse fácilmente a partir de la simulación, mientras que estos pudieran ser más difíciles de obtener experimentalmente. Los modelos de simulación pueden clasificarse en analíticos o atomistas [53, 55, 56]. Los modelos atomísticos en lo general resultan en 2D, simulando la microestructura y morfología de la capa delgada, aunque modelos en 3D para el crecimiento de estas estructuras han sido reportados mediante simulaciones atomísticas, como se puede observar en [57] haciendo un amplio uso de la Física Estadística. En todas las fuentes bibliográficas consultadas los modelos propuestos se resuelven en condiciones cercanas al equilibrio termodinámico, aunque sean procesos que ocurren fuera de este. Debido a la complejidad que presenta el asunto.



### 2.5.1 Modelo de deposición balística.

El modelo de agregación balística (AB) fue desarrollado por *Voids* y *Sutherland* [58] para desarrollar una mejor comprensión en una agregación coloidal. En este modelo, las partículas se agregan una a la vez a un *clusters* de partículas utilizando trayectorias lineales que tienen posiciones y direcciones seleccionadas al azar. En la versión más estudiada de este modelo, las partículas son hiperesféricas y todas del mismo tamaño. Este modelo conduce a grupos con una estructura porosa compleja que a veces se ha descrito en términos de una dimensionalidad fractal ( $D$ ) que es más pequeña que la dimensionalidad euclidiana ( $d$ ) del espacio en el que se lleva a cabo la simulación. Esto significa que la estructura interna de los agregados balísticos es uniforme en todas las escalas excepto las de corta longitud. Aunque esta es una de las conclusiones que se propone en [58], no se da crédito a esta observación. Este modelo se ha empleado también en el estudio de la deposición de partículas sobre un sustrato [59-61].

Existe la variante de deposición aleatoria (DA), este es un proceso de deposición simple donde las partículas son sólidas y no pegajosas, se depositan sobre una superficie en sitios seleccionados al azar.

Una medida cuantitativa de la rugosidad de la superficie, es conocida como ancho de superficie,  $W(L, t)$ , la cual se define en términos de la altura de la superficie  $h(i, t)$  en el sitio  $i$  y el tiempo  $t$  como se muestra en la **Ecuación (8)**:

$$W(L, t) = \sqrt{\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L [h(i, t) - \langle h(t) \rangle]^2} \quad (1)$$

En este modelo en cada sitio crece independientemente de los otros sitios y la rugosidad de la superficie crece sin límite. No hay vacíos al azar, por lo que la estructura de deposición es compacta, “ $L$ ” es conocida como el tamaño del sistema.

La deposición balística da lugar a estructuras porosas a medida que las partículas depositadas se adhieren a la primera superficie que encuentran en su viaje vertical descendente hacia sitios seleccionados al azar. En **AB**, el las partículas se

comportan como muy pegajosas, mientras que en **DA** son no se consideran pegajosas en absoluto [60]. En la naturaleza, sin embargo, las partículas pueden tener adhesividad intermedia que varía entre los dos extremos de comportamiento fuertemente pegajoso y completamente antiadherente.

### **2.5.2. el Método Cinético de Monte Carlo (kMC) y el software NASCAM®**

El código utilizado en el *software* NASCAM® (*NanoSCALE Modeling*) se ha desarrollado para simular a escala atómica la evolución temporal de un sistema en el cual es llevado a cabo un evento de deposición bajo condiciones definidas por el usuario, este proceso se lleva utilizando el método cinético Monte Carlo (kMC) [62, 63]. Dado que el método kMC no tiene en cuenta el movimiento vibratorio de los átomos, puede utilizarse para estudiar la evolución de un sistema durante períodos de tiempo más largos (similar a un experimento real empleando tiempos que abarcan entre los segundos y las horas) que el método de la Dinámica Molecular ( $\sim 10^{-9}$  s). Dependiendo del número de átomos en el sistema, junto con algunos otros parámetros como la temperatura y las propiedades atómicas, el tiempo empírico (a diferencia de la simulación) podría ser incluso de cientos a miles de segundos.

Hay varios enfoques para implementar el método kMC. La creación y el uso de una tabla o lista de eventos kMC completa, es el enfoque más preciso. También es el método que consume más tiempo, ya que es necesario calcular las tasas de eventos de ocurrencias para una gran cantidad de eventos. En el caso de un método de recuento de enlaces, en kMC, se calculan las tasas de eventos teniendo en cuenta el número de vecinos más cercanos. En un enfoque de evento de kMC específico, solo se permite que ocurra un conjunto predefinido de eventos, y las tasas de estos eventos se utilizan como entrada. Este es el enfoque kMC utilizado por NASCAM.

Si bien el último enfoque no es tan preciso como utilizar una tabla completa de eventos, permite simular el comportamiento general de un sistema dado y requiere menos tiempo de cálculo, lo que permite simular la evolución de un sistema con un mayor número de partículas. Esto es importante especialmente para modelar un sistema a temperaturas elevadas.

El número total de pasos necesarios para simular la evolución de un sistema durante un período de tiempo determinado se puede derivar de la siguiente manera. Supongamos “ $N$ ” mecanismos físicos activados térmicamente (por ejemplo, difusión libre de partículas y evaporación). Llamamos evento a cualquier movimiento que pueda estar asociado con el alguno de estos mecanismos físicos. Los eventos pueden ocurrir en direcciones determinadas (por ejemplo, difusión hacia la derecha o hacia la izquierda). Llamamos  $v_i$  al número de direcciones posibles para un mecanismo dado “ $i$ ”.

La tasa de eventos elementales para un evento dado, obedece a la ley de Arrhenius [64]:

$$w_i = w_0 \exp(-E_i/k_B T) \quad (2)$$

De donde  $w_0$  es la frecuencia de evento (puede ser estimada como  $w_0 = 2k_B T/h$ ) y  $T$  es la temperatura en escala absoluta,  $h$  la constante de Planck y  $k_B$  la constante de Boltzman.

También es posible definir el tiempo de ocurrencia entre dos eventos mediante la **Ecuación (3)**:

$$\Delta t = \left[ \sum_{i=1}^N v_i w_i \right]^{-1} \quad (3)$$

donde la suma se realiza sobre todos los posibles mecanismos de eventos, “ $N$ ”, en el sistema. Si para una partícula “ $j$ ” dada tenemos,  $v_i(j)$  posibles direcciones de difusión correspondientes al mecanismo de eventos “ $i$ ”, la relación anterior se puede reescribir como:

$$\Delta t = \left[ \sum_{i=1}^N \left\{ \sum_{j=1}^{N_{at}(i)} v_i(j) \right\} w_i \right]^{-1} \quad (4)$$

$N_{at}(i)$  es el número total de partículas que pueden participar en un evento con índice “ $i$ ”.

Si consideramos que la difusión puede ocurrir solo entre dos posiciones vecinas más cercanas y  $v_i(j)$  puede tener valores que comienzan desde cero hasta el número de posiciones vecinas más cercanas, entonces la segunda suma en la **Ecuación (4)** se puede extender sobre el número total de partículas en el sistema,  $N_{at\_tot}$ :

$$\Delta t = \left[ \sum_{i=1}^N \left\{ \sum_{j=1}^{N_{at\_tot}(i)} v_i(j) \right\} w_i \right]^{-1} \quad (5)$$

Utilizando la **Ecuación 2** y la **Ecuación 5** es posible estimar el número total de pasos requeridos para modelar la evolución de un sistema durante un período de tiempo,  $t_{tot}$ , como  $N_{steps} = \Delta t / t_{tot}$ :

$$N_{steps} = t_{tot} \left[ \sum_{i=1}^N \left\{ \sum_{j=1}^{N_{at\_tot}} v_i(j) \right\} w_0 \exp(-E_i / k_B T) \right] \quad (6)$$

Si la temperatura es lo suficientemente elevada como para descuidar las contribuciones de todos los eventos, excepto el correspondiente a la barrera de energía más baja (el evento más común), “s”, entonces la ecuación 5 se convierte en:

$$\begin{aligned} N_{steps} &= t_{tot} v_s w_0 \exp(-E_s / k_B T) \\ &= t_{tot} \left[ \sum_{i=1}^N \left\{ \sum_{j=1}^{N_{at\_tot}} v_i(j) \right\} w_0 \exp(-E_i / k_B T) \right] \end{aligned} \quad (7)$$

Por lo tanto, el tiempo total de cálculo está relacionado principalmente con el evento que tiene la barrera de energía más baja. Por ejemplo, un aumento de temperatura de 50°C conduce a un aumento de los pasos de kMC requeridos en un orden de magnitud. Sin embargo, la cantidad de partículas tan grandes como  $10^4$  y el tiempo de evolución del sistema dentro de  $10^2 \sim 10^3$  segundos siguen siendo aceptables para NASCAM incluso para temperaturas altas como los 1000 K.

Otra característica de dicho enfoque del kMC en NASCAM®, es cuando se usa para simulaciones de alta temperatura y existen dos mecanismos con energías de activación cercanas, en esta situación se puede usar la misma energía de activación para ambos, porque las tasas de eventos son aproximadamente las mismas ( $w_1/w_2 = \exp(-\Delta E_{12}/k_B T)$ ), a medida que aumenta la temperatura.

Por último, y en conexión con la observación anterior, el método kMC elegido, brinda la posibilidad de realizar simulaciones de alta temperatura utilizando parámetros que no se conocen con precisión; esto se debe a que los errores en la determinación de los valores de las energías de barrera no conducen a grandes cambios en las tasas de eventos.

## **2.6. Transferencia de calor y mecanismos de envejecimiento en recubrimientos de aluminio.**

Conocer cómo se lleva a cabo el proceso de transferencia de calor en el recubrimiento empleado ayuda a entender el mecanismo de envejecimiento del sistema. Pudiéndose así estudiar medidas que favorezcan al aumento del tiempo útil de vida de nuestro sistema. A continuación, se presentará los fundamentos teóricos en la transferencia de calor de una capa delgada.

### **2.6.1. Transferencia de calor en una capa delgada de aluminio.**

El calor es la forma de energía que se puede transferir de un sistema a otro como resultado de la diferencia en la temperatura entre ellos [65]. La cantidad de calor de un sistema que se desarrolle en cierto proceso, desde un estado de equilibrio a otro, se puede determinar con la aplicación del análisis termodinámico, pero, la termodinámica no indicará en cuánto tiempo transcurrirá. En la práctica tiene gran interés hallar la velocidad de transferencia de calor. La termodinámica trata de estados de equilibrio y de los cambios desde un estado de equilibrio hacia otro. Por otra parte, la transferencia de calor se ocupa de los sistemas en los que falta el equilibrio térmico y, por lo tanto, existe un fenómeno de no equilibrio [66]. Sin embargo, las leyes de la termodinámica ponen la estructura para la ciencia de la transferencia de calor. En la primera ley se requiere que la velocidad de

transferencia de energía hacia un sistema sea igual a la velocidad de incremento de energía de ese sistema. En la segunda ley se requiere que el calor se transfiera en la dirección de la temperatura decreciente.

El calor se puede transferir en tres modos diferentes: 1-Conducción, cuando la transferencia de calor se lleva a cabo en un sólido o un fluido en reposo mediante movimiento a escala molecular, que es más intenso a mayor temperatura, 2-Radiación, consiste en la emisión de radiación electromagnética por cuerpos a temperaturas distintas al cero absoluto el último modo es el de 3-Convección, este proceso ocurre mediante una transferencia de calor dentro de un fluido que fluye con movimientos a escala macroscópica [66]. Como característica común, todos los modos de transferencia de calor requieren de la existencia de una diferencia de temperatura y todos ellos ocurren desde el medio que posee la temperatura más elevada hacia uno de temperatura más baja, y la transferencia de calor se detiene cuando los dos medios alcanzan la misma temperatura [66].

Fourier (en 1822) encontró que *"el flujo de calor en el interior de un sólido o de un fluido en reposo es proporcional al gradiente local de temperatura y a la conductividad térmica del material"* [66], como se muestra en la **Ecuación (8)**, de donde  $q$  es el flujo de calor por unidad de tiempo, y por unidad del área normal a la dirección de propagación las unidades son en  $W/m^2$ ,  $k$  es la conductividad térmica del material se expresa en  $W/m^{\circ}C$ , en nuestro caso es de  $237 W/m^{\circ}C$  [67],  $T$  representa el campo de temperatura en cada una de las direcciones  $x,y,z$  representadas por la letra "i",  $T$  es la temperatura en  $^{\circ}C$ ,  $A$  no es más que el área que está en contacto con el flujo de calor, sería todo el recubrimiento.

$$q_i = -k_i A \frac{\partial T}{\partial i} \quad (8)$$

En la mayoría de los metales y aleaciones, así como en los fluidos, las conductividades son independientes de la dirección de propagación (material isótropo).

### **2.6.2. Características del recubrimiento protector en capas de aluminio.**

Los reflectores de aluminio generalmente están recubiertos con una capa superior e inferior a base de siloxano que se deposita mediante deposición Química en fase Vapor mejorada por Plasma (PECVD por sus siglas en inglés). Esta tecnología ya establecida proporciona una excelente protección contra la corrosión promovida por calor, humedad, niebla salina, entre otros factores ambientales; es importante mencionar que esta capa debe aplicarse rápidamente para minimizar la oxidación e incrementar la resistencia a la abrasión, además se mejora la adhesión de la capa de aluminio sobre el sustrato polimérico, estas capas son de un espesor de aproximadamente entre 25 y 50 nm [68-70].

La reflexión total de este sistema multicapa base a siloxano es inferior al 5% sobre el rango espectral visible y permanece prácticamente sin cambios después de una exposición del recubrimiento a 400°C durante al menos 200 h [71].

Es por ello que en este trabajo no se considerara los efectos no deseados que estas capas pueden introducir en cuanto afectar el proceso de reflexión de la luz sobre la capa de aluminio.

## HIPÓTESIS

Es posible evaluar las propiedades ópticas, como la reflectancia y las constantes ópticas, en capas delgadas de aluminio sobre  $\text{SiO}_2$  mediante el método Monte Carlo Cinético, modificando variables que intervengan en la etapa del aluminizado y relacionar sus efectos sobre la reflectancia final de los recubrimientos.

## OBJETIVOS

### General

Obtener la mayor cantidad de información posible relacionada con la reflectancia en recubrimientos de  $\text{Al/SiO}_2$ , al ser modificadas variables que intervienen en la fase de la deposición mediante la técnica de *sputtering*, a partir de simulaciones a escala nanométrica empleando el método de Monte Carlo Cinético.

### Específicos

- Lograr el modelado de los recubrimientos 3D con los diferentes parámetros bajo los cuales se obtendrá información relevante sobre las propiedades ópticas del sistema.
- Determinar el comportamiento de la reflectancia para diferentes temperaturas del sustrato, cuando se lleva a cabo la deposición.
- Elucidar el comportamiento de la reflectancia cuando se varía el ángulo con el cual se lleva a cabo la deposición de los átomos de aluminio sobre el sustrato.
- Evaluar cómo influye la velocidad de deposición(R), de los átomos de aluminio sobre el sustrato, a la reflectancia final del recubrimiento.
- Determinar el comportamiento de la rugosidad superficial de los recubrimientos y cómo influye esta sobre la reflectancia del recubrimiento.
- Establecer si influye el espesor del sustrato sobre la reflectancia, para cada espesor del recubrimiento.
- Determinar los valores de las constantes ópticas del sistema y analizar si sufren cambios ante las modificaciones de las variables experimentales.



## Conclusiones del Capítulo I

Se expuso un resumen del estado del arte de las tecnologías en el ámbito de las *headlamps* y los modelos de crecimiento de capas delgadas, estrechamente ligadas al proceso de metalización. Se hizo énfasis en dicho proceso por la necesidad existente para mejorar las propiedades ópticas del componente reflector además se exponen las diferentes técnicas que se emplean en la fabricación de recubrimiento. Por último, se expone la hipótesis y los objetivos que este trabajo plantea a cumplir.

Es importante resaltar que el proceso de desarrollo en productos automotrices sufre cada vez más las enormes presiones de tiempo y calidad debido a la mayor complejidad, la creciente competencia y la disponibilidad de nuevas tecnologías. Para tener éxito, las empresas deben colaborar estrechamente en una variedad de disciplinas, en nuestro caso áreas como la electrónica de circuitos y la ciencia de materiales convergen para obtener un producto final. En este escenario, la externalización estratégica de servicios de ingeniería se ha convertido en una fuente importante de ventaja competitiva para el sector automotriz de las empresas. El desarrollo de los diferentes productos en todas las empresas, e incluso dentro de una sola empresa, a menudo se realiza en un entorno heterogéneo. Por ello es importante resaltar el papel de poder contar con un personal capacitado capaz de fluir a través de las diferentes tecnologías presentes en el proceso de fabricación requerido. Aportando mejoras que repercutan de manera positiva al desarrollo tecnológico en *Varroc Lighting Systems*©.

## CAPÍTULO II

### MATERIALES Y METODOLOGÍA

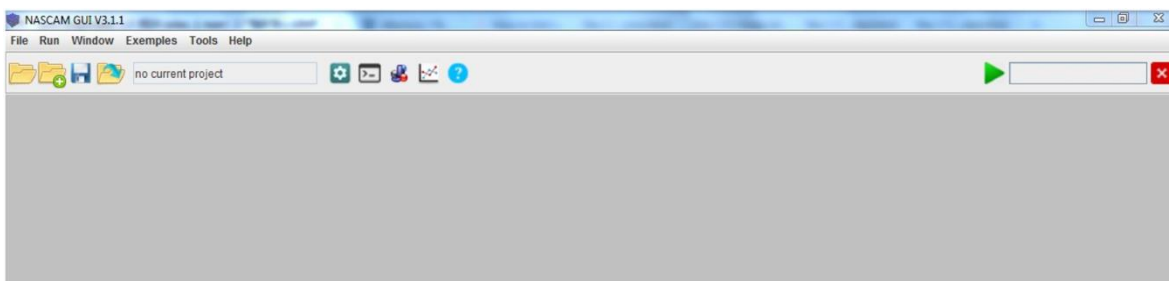
---

En este Capítulo se expone todo lo referido al procedimiento experimental llevado a cabo en esta investigación. Se abordará sobre el funcionamiento del *software* NASCAM® y se detallarán los *experimentos* que se realizaron durante esta investigación.

#### 1. El *software* NASCAM®.

NASCAM® (en lo adelante NASCAM), es un código de libre distribución desarrollado en la Universidad de Namur [72], para predecir y caracterizar propiedades morfológicas, ópticas, eléctricas, entre otras en capas delgadas, a través de la simulación del proceso de deposición, difusión, nucleación y crecimiento de átomos en una superficie. NASCAM® simula la evolución en el tiempo a escala atómica de un sistema bajo condiciones de deposición usando el método de Monte Carlo cinético (kMC), dado que kMC no tiene en cuenta el movimiento vibracional de los átomos; estudia la evolución del sistema por largos periodos de tiempo, desde segundos hasta horas. El código permite hacer uso de diferentes herramientas para la caracterización de las películas depositadas. Estas herramientas ya vienen implementadas en el mismo por lo que se facilita todo el proceso de caracterización que se vaya a usar. Para este trabajo se usaron las herramientas de caracterización óptica y las relacionadas con la determinación de la rugosidad superficial.

En la **Figura 8** se muestra el entorno bajo el cual opera NASCAM, es un entorno modular que funciona por apartados. Cada apartado cumple con una tarea específica que aborda desde el diseño o selección del sustrato a utilizar hasta el apartado de las herramientas (*tools*) que permiten caracterizar la deposición que se realice.



**Figura 8** Entorno de la interfaz gráfica de NASCAM.

NASCAM cuenta con un sistema de ayuda excelente, el cuál puede ser consultado en [72]. Con el objetivo de no saturar la descripción haremos solo énfasis en los apartados más relevantes para nuestro trabajo.

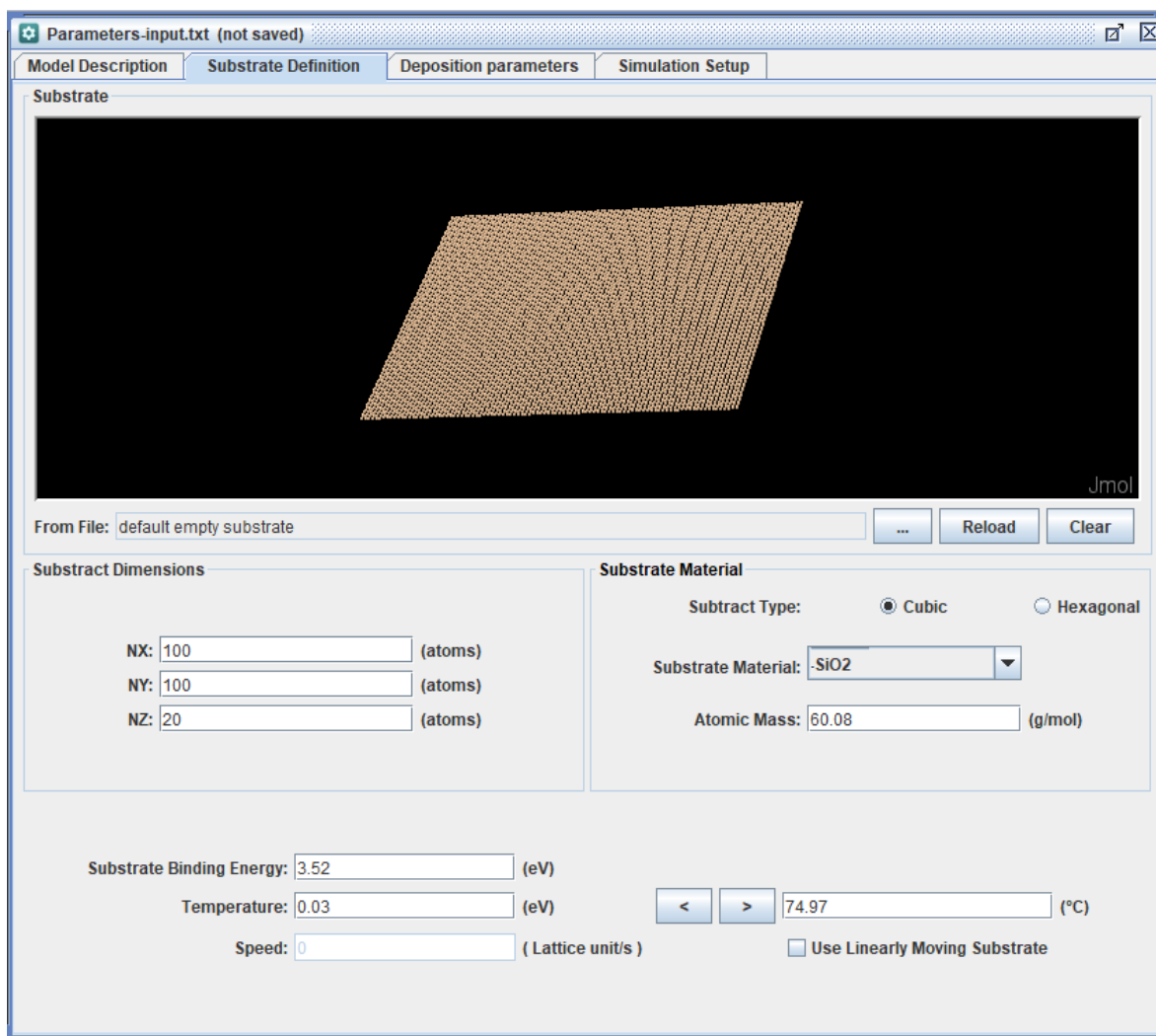
### **1.1. El sustrato.**

NASCAM brinda la facilidad de crear sustratos con geometrías variadas adaptándose a la necesidad y experiencia del usuario. NASCAM puede utilizar ficheros “.xyz” los cuales guarden información relacionada con las posiciones atómicas del material que se quiera simular. Incluso admite hacer uso de digitalizaciones de imágenes obtenidas por microscopía de fuerza atómica mediante el uso de otro *software* como *ImageJ* [73] de una manera simple.

En nuestra investigación decidimos utilizar como material de sustrato el óxido de silicio ( $\text{SiO}_2$ ). Basados en que este trabajo constituye en primera instancia una aproximación fuera de la escala real, de cómo diversos factores que intervienen durante el aluminizado de las *headlamps* afectan la reflectancia final de los recubrimientos. Por ello nos basamos en información existente en la literatura [29] que nos habla del uso de una capa semilla entre el PC y el aluminio que va a recubrir al faro con el fin de mejorar la adhesión y pasivar morfológicamente la superficie de PC. Esta capa semilla es un polímero rico en óxido de silicio y como las deposiciones no ocurren de manera epitaxial en la práctica, decidimos que un sustrato para este trabajo podía ser el  $\text{SiO}_2$ .

### 1.1.1. Definición del sustrato

El primer paso es establecer sobre qué sustrato se va a llevar a cabo la deposición. NASCAM cuenta con la facilidad de que se puede escoger el material, los elementos de la tabla periódica, sin incluir tierras raras, y algunos óxidos entre los que se



**Figura 9.** Entorno para establecer los parámetros del sustrato.

encuentra el  $\text{SiO}_2$ . En el apartado de Parámetros se puede llevar a cabo este proceso como se observa en la **Figura 9**.

En el apartado de “Dimensiones del sustrato” se establece la cantidad de átomos posibles que van a conformarlo, en esta versión gratuita solo es posible establecer la cantidad de 200000 átomos y el usuario puede decidir cómo distribuir esta cantidad en cada uno de los ejes cartesianos x, y o z. En nuestro trabajo se prefirió

trabajar con 100 átomos a lo largo del eje “X”, 100 en el eje “Y” y 20 átomos sobre el eje “Z”, los cuales conforman dimensionalmente una estructura tipo prisma.

La energía de enlace con el sustrato se utiliza para calcular la energía umbral en la creación de un defecto. NASCAM utiliza la temperatura dada en eV, pero su valor en °C puede establecerse usando el campo correspondiente. Por supuesto, después de establecer el valor correcto de la temperatura en eV a partir de su valor en °C el usuario debe guardar su elección antes de iniciar una nueva simulación.

La restante información relacionada con la creación del sustrato es definir la masa atómica de los elementos que lo componen y establecer qué tipo de estructura cristalina va a poseer. En nuestro trabajo no se realizó una deposición epitaxial, por lo que estableceremos como cúbica la estructura cristalina del sustrato.

## **1.2. Parámetros de la deposición**

NASCAM cuenta con un apartado donde se relacionan los parámetros que están en función de la deposición de la o las especies con las que se va a realizar el recubrimiento.

Toda la información sobre las características geométricas y energéticas de las partículas entrantes y su cantidad relativa puede establecerse bajo este marco. Las características de movimiento de oscilación y rotación del sustrato y su eventual ángulo de inclinación inicial también pueden modificarse aquí en este apartado.

En la **Figura 10** se observa la ventana de trabajo donde pueden modificarse los valores como el gas de purga del sistema, la energía media de los átomos que van a llegar a la superficie y con qué ángulo respecto a la normal será la incidencia de la deposición.

Entre los parámetros que pueden ser modificados se encuentran la rotación del soporte en donde está el sustrato, qué tipo de gas se utilizará para la purga del sistema, esta opción no fue contemplada en nuestra simulación, por lo que en el valor del flujo de gas se colocó en 0 para evitar tener presencias de átomos diferentes al aluminio que pudieran contribuir como impurezas en la fase de nucleación e introducir ciertos cambios no concebidos en el desarrollo experimental

de la investigación. En la sección existe un apartado para configurar la energía con que los átomos de aluminio llegarán a la superficie. En nuestro caso se trabajó con la opción de la energía media de los átomos incidentes de un valor 0.22 eV. Este valor está en correspondencia con la energía térmica para los átomos de aluminio en su fase vapor según se reporta en [74].

Parameters-input.txt

Current Parameter File: input.txt [Delete] [Import] [New]

Model Description | Substrate Definition | **Deposition parameters** | Simulation Setup

☐ Use Masked Deposition      Atomic displacement energy of growing film: 3.3 (eV)

☐ Use Tilt & Rotation      Sputtering Threshold: 4.5 (eV)

Sputtering Yield: 0.6

**Metal** | **Gas**

Flux: 0.0 (Arbitrary Unit) ?

Specie: Ar      Atomic Mass: 39.948 (g/mol)

**Energy Distribution**

☐ From File  
E\_Gas.txt

☒ Constant Energy  
Energy of incident atoms: 0.5 (eV)

☐ Analytical Function  
Mean energy of incident atoms: 0.5 (eV)

**Angular Distribution**

☐ From File  
A\_Gas.txt

☒ Analytical Function

$\theta_0$ : 0.0 [0,90°]  
 $\varphi_0$ : 0.0 [-180,180°]  
 $\Delta\theta$ : 0.0 [0,90°]

**Figura 10.** Interfaz de la herramienta virtual para establecer los parámetros durante la deposición.

En la sección correspondiente a la distribución angular y la forma en la que será llevado a cabo la deposición. El ángulo  $\theta$  corresponde a la dirección de la deposición con respecto a la normal a la superficie, mientras que el ángulo  $\varphi$  define en valor angular la apertura del cono que formaran los átomos una vez emitidos de la fuente puntual.

### 1.2.1. Configuración de la simulación.

El último apartado relacionado con la deposición es el de la configuración y características propias de los átomos a depositar. En la **Figura 11** se muestra la herramienta encargada de introducir estos valores.

Parameters-input2.txt

Model Description Substrate Definition Deposition parameters Simulation Setup

Simulation Duration

Number of deposited atoms: 1000 (atoms)

Annealing time: 0.0 (s)

Deposition Rate: 0.003 (ML/s)

Intermediate Result

Save statistics every: 1 deposited atoms or seconds

Save intermediate results every: 500 deposited atoms or seconds

☒ Save intermediate 3D structures

☐ Display final 3D structure when simulation is complete

☒ Display intermediate 3D structure

☐ Display final statistics graphs

☐ No on-line calculation of the island number (speed up the code)

☐ Advanced Mode

**Figura 11.** Parámetros relacionados con la configuración de las especies a depositar.

La duración de la simulación estará determinada por la cantidad de partículas a depositar y por la velocidad a la que ocurrirá esa deposición. En este apartado como parámetros claves están el número de átomos a depositar que para nuestro trabajo se seleccionaron los valores entre los 150 000 átomos y los 2 500 000. Estos valores

fueron determinados experimentalmente analizando la manera más acertada para dividir el rango de 100 nm, que NASCAM nos permite trabajar. Con esa cantidad de átomos se obtuvieron espesores promedios correspondientes a 6 nm, 12 nm, 25 nm, 50 nm, 80 nm y 100 nm. Todo el proceso constó de una etapa de repetibilidad de los experimentos para así lograr obtener una estadística relacionada al comportamiento de magnitudes como la rugosidad o los espesores en valores promedios.

La última variable de relevancia para nuestra investigación fue la razón o velocidad de deposición, esta posee unidades de monocapa por segundo, lo que permite seleccionar cuantas capas atómicas se desean depositar en una unidad de tiempo. En la literatura valores como 0.4 ML/s, 0.6 ML/s y 1 ML/s son los valores más comunes en los sistemas físicos de *sputtering* que permiten el control de esta magnitud [75].

### 1.3. Herramientas virtuales del **software NASCAM®**.

El *software* NASCAM hace uso de disímiles herramientas que conforman un sólido laboratorio virtual para realizar las pruebas más comunes que se practican en el campo de las capas delgadas. Aunque este *software* es de libre distribución cuenta con una versión de paga y en los manuales del propio programa existen cierta ambigüedad para conocer cómo funcionan cada una de las herramientas, acción sustentada en proteger los derechos intelectuales de los propietarios del *software*. Por ello y por la relevancia para nuestro trabajo abordaremos en la determinación de la rugosidad y de las propiedades ópticas que son las magnitudes más relevantes para nuestra investigación.

#### 1.3.1. Rugosidad

La herramienta que permite determinar la rugosidad hace uso de la rugosidad RMS (*Root Mean Square*), esta se obtiene a partir de la **Ecuación (9)**.

$$RMS = \sqrt{\langle h^2 \rangle - \langle h \rangle^2} \quad (9)$$



Donde  $h$  es una función de las posiciones atómicas para cada átomo que se encuentra sobre el sustrato. Los operadores “< >” significan valores medios de esas magnitudes. La rugosidad  $RMS$  puede ser expresada en función de la función de estructura  $G(R)$  y la función de auto-covarianza  $C(R)$ . En la **Ecuación (10)** y **(11)** se relacionan como se obtienen.

$$G(r) = \langle (h(x + R, y) - h(x, y))^2 \rangle \quad (10)$$

$$C(r) = \langle 2(h(x + R, y)h(x, y)) \rangle \quad (11)$$

A través de **(10)** y **(11)** se puede relacionar la rugosidad  $RMS$  mediante la siguiente **Ecuación (12)**:

$$G(R) + C(R) = 2 * RMS^2 \quad (12)$$

Mientras que la rugosidad da la información sobre la variación del espesor de la película, estas funciones se utilizan para estimar el tamaño característico de las estructuras de la superficie. La superficie de la película viene dada por la **Ecuación 13**.

$$h = H_0 + h_0 * \text{sen}(k * x) \quad (13)$$

donde  $H_0$  es el grosor medio de la capa delgada,  $h_0$  es la variación de esta, el tamaño característico de la estructura de la superficie es  $R_0 = \pi/k$ . Entonces la rugosidad de la superficie es igual a:

$$RMS = 0.5 * h_0^2 \quad (14)$$

La **Ecuación (14)** tiene como limitante que no brinda información sobre la estructura espacial en la superficie, pero al mismo tiempo contamos con la función de estructura  $G(R)$ , ésta sí la podemos expresar en función de  $R$  y  $R_0$  como se presenta en la **Ecuación (15)** y además es posible extraer información relacionada con el tamaño de los objetos que se encuentren en ella.

$$G(R) = h_0^2 * \left[ 1 - \cos\left(\frac{\pi R}{R_0}\right) \right] \quad (15)$$

Si estos objetos presentan posiciones irregulares es posible usar la siguiente aproximación para  $G(R)$ , mediante la **Ecuación 16**.

$$G(R) = 2 * RMS^2 \left[ 1 - \exp\left(\frac{-R^2}{R_0^2}\right) \right] \quad (16)$$

Esta es la información que se brinda respecto a la rugosidad. El *software* solo requiere el fichero “coating.xyz” como valores de entrada; a partir de ahí se hace el procesamiento de la rugosidad y de las funciones de correlación. La rugosidad viene reportada en parámetros de red y la correlación en parámetros de red por unidades cuadradas.

### 1.3.2. Determinación de los parámetros ópticos del sistema.

En este apartado, NASCAM®, permite que el usuario sea capaz de conocer propiedades ópticas como la reflectancia, la transmitancia, absorbancia y valores de las constantes ópticas mediante la herramienta nombrada “ÓPTICA”. A continuación, expondremos cómo funciona esta herramienta y cómo nos permite conocer los valores de estas magnitudes para un rango del espectro electromagnético comprendido entre los 300 nm y los 1000 nm.

Se necesitan dos pasos para la caracterización óptica de la estructura. El primero es el cálculo de la función dieléctrica efectiva  $\epsilon_{eff}$  (en cada capa óptica y para cada longitud de onda) basada en la teoría del medio efectivo [76]. Cinco modelos ópticos están disponibles para determinar esta función:

**1-**El método del Volumen Medio:

$$\epsilon_{eff} = \sum_{i=1}^n f_i \epsilon_i \quad (17)$$

Donde en la **Ecuación (17)**  $f_i$  representa la fracción del volumen que se esté analizando y  $\epsilon_i$  representa la función dieléctrica del dominio del material que

compone nuestro sistema de estudio. Este método desde una perspectiva de cómputo es rápido para hacer los cálculos, pero no es exacto. Es mayormente utilizado para superficies con valores de rugosidad muy bajos y niveles de porosidad ínfimos.

## 2- El método de Lorentz-Lorentz:

Este es similar al método anterior, pero con la introducción de factores de corrección que mejoran la exactitud de los cálculos como aparecen en la **Ecuación (18)**.

$$\frac{\epsilon_{eff} - 1}{\epsilon_{eff} + 2} = \sum_{i=1}^n f_i \frac{\epsilon_i - 1}{\epsilon_i + 2} \quad (18)$$

## 3- El método Maxwell-Garnett:

Este es un método comúnmente utilizado cuando se trata la deposición de pocos materiales en la estructura de capas delgadas, es decir existe el predominio de un elemento por el cual están compuestas las capas. En la **Ecuación (19)** se expresa cual es la relación que existe entre la función dieléctrica, la polarizabilidad del medio y los defectos que pueda poseer el sistema como es la porosidad.

$$\frac{\epsilon_{eff} - \epsilon_h}{\epsilon_{eff} - y\epsilon_h} = \sum_{i=1}^n f_i \frac{\epsilon_i - \epsilon_h}{\epsilon_{eff} + y\epsilon_h} \quad (19)$$

De donde  $\epsilon_h$  es la función dieléctrica del material a depositar, la variable “y” está relacionada con la polarizabilidad del sistema mediante la relación expresada en la **Ecuación (20)**.

$$y = 1/L - 1 \quad (20)$$

El factor L es el factor de polarización y toma valores en el intervalo [0,1]. Por lo general los poros que pueden estar presente para este tipo de estructuras son esféricos por lo que un valor utilizado por defecto es el de  $L=1/3$ .

#### 4- El método de Bruggeman.

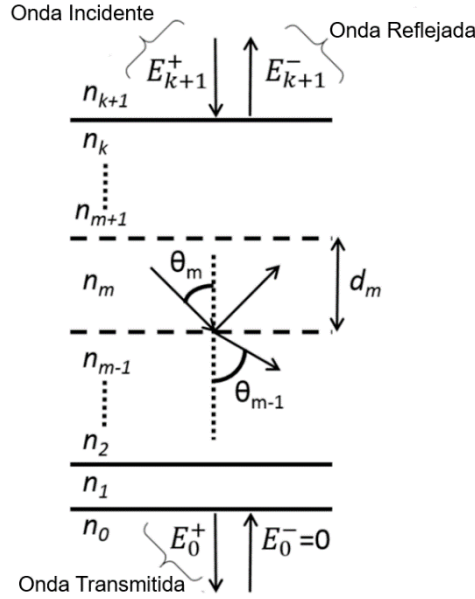
Este método es el más utilizado cuando el material que se deposita presenta una estructura muy porosa por lo que no es posible definir la formación de las capas. Este método no puede ser resuelto de manera analítica a menos que solo existan como máximo dos especies a depositar o menos [77]. La **Fórmula 21** muestra la relación existente para determinar la función dieléctrica efectiva.

$$\sum_{i=1}^n f_i \frac{\epsilon_i - \epsilon_{eff}}{\epsilon_i + 2\epsilon_{eff}} = 0 \quad (21)$$

#### 5-El método híbrido.

Este método utiliza los modelos de Maxwell-Garnett y Bruggeman. La elección del modelo es función de la relación de volumen de cada material para cada capa donde se analizan estos parámetros ópticos. Si se encuentra un material "dominante" se utiliza el modelo de Maxwell-Garnett, si no, se elige el modelo Bruggeman. El método híbrido necesita de todos los parámetros de los modelos de Maxwell-Garnett y Bruggeman.

El segundo y último paso de la caracterización óptica de la estructura, consiste en calcular su reflectancia, transmitancia y absorbancia en función de la longitud de onda y el ángulo de incidencia. Esto se hace utilizando un código de matriz de transferencia basado en el cálculo de los coeficientes de Fresnel en cada capa estructura óptica [78]. En la **Figura 12** se muestra el mecanismo para conformar la matriz de transferencia.



**Figura 12.** Principio de obtención de la matriz de transferencia, simplificado a un medio isotrópico 1D, tomado de [72].

Para cada interface entre dos capas se necesita calcular los coeficientes de Fresnel, que vienen expresados por las siguientes relaciones recogidas en la **Ecuaciones (22, 23, 24 y 25)**.

$$r_m^p = \frac{n_m \cos \theta_{m-1} - n_{m-1} \cos \theta_m}{n_m \cos \theta_{m-1} + n_{m-1} \cos \theta_m} \quad r_m^s = \frac{n_m \cos \theta_m - n_{m-1} \cos \theta_{m-1}}{n_m \cos \theta_m + n_{m-1} \cos \theta_{m-1}}$$

$$t_m^p = \frac{2 n_m \cos \theta_m}{n_m \cos \theta_{m-1} + n_{m-1} \cos \theta_m} \quad t_m^s = \frac{2 n_m \cos \theta_m}{n_m \cos \theta_m + n_{m-1} \cos \theta_{m-1}}$$

Teniendo estas relaciones el próximo paso es determinar cuál es el ángulo de incidencia para la onda electromagnética en cada capa, esto se puede hacer mediante el uso de la ley de Snell:

$$n_m \sin \theta_m = n_{m-1} \sin \theta_{m-1}$$

$$\theta_{m-1} = \text{Real}[\sin^{-1}(\frac{n_m}{n_{m-1}} \sin \theta_m)] - i * \text{abs}[\sin^{-1} \theta_m] \quad (26)$$

Para obtener la fase de la onda incidente se utiliza la expresión del factor de fase  $\delta$ . El cual viene determinado por la **Ecuación (27)**

$$\delta_m = \frac{2\pi}{\lambda} n_m d_m \cos \theta_m \quad (27)$$

Con las expresiones antes mostradas es posible calcular las matrices de transferencias en cada capa estableciendo una relación entre los valores de intensidad de campo eléctrico incidente, reflejado y transmitido.

$$M_{m-1} = \frac{1}{t_m} \begin{bmatrix} \exp(i\delta_{m-1}) & r_m \exp(-i\delta_{m-1}) \\ r_m \exp(i\delta_{m-1}) & \exp(-i\delta_{m-1}) \end{bmatrix} \quad (28)$$

$$\begin{bmatrix} E_{k+1}^+ \\ E_{k+1}^- \end{bmatrix} = M_k M_{k-1} \dots M_2 M_1 \begin{bmatrix} E_0^+ \\ E_0^- \end{bmatrix} \quad (29)$$

A partir de las relaciones anteriores es posible determinar cuáles serán los valores de la reflectancia (R), transmitancia (T) y absorbancia (A) mediante las siguientes expresiones.

$$R = \frac{|E_{k+1}^-|^2}{|E_{k+1}^+|^2} \quad (30)$$

$$T = \frac{n_0 \cos \theta_0}{n_{k+1} \cos \theta_{k+1}} \frac{|E_{k+1}^+|^2}{|E_{k+1}^-|^2} \quad (31)$$

$$A = 1 - R - T \quad (32)$$

En nuestro trabajo se empleó luz coherente para irradiar las muestras, aunque este método también puede ser empleado para estudios que requieran el empleo de una fuente de luz incoherente.

## 2. Diseño experimental desarrollado durante la investigación.

Para llevar a cabo esta etapa analizamos las facilidades que nos brinda NASCAM. Se seleccionaron variables que intervenían en el proceso de la deposición como son la temperatura del sustrato, la velocidad de deposición y el ángulo bajo el cual se depositan los átomos de aluminio. La modificación de estas variables fue en un intervalo para cada una de ellas que respondieran a la realidad, en la manufactura

de los faros de los automóviles, y posteriormente analizamos como estas variaciones afectaban la reflectancia final del sistema.

El *software* NASCAM solo permite estudios para recubrimientos comprendidos en la escala nanométrica. Por ello decidimos analizar el comportamiento de la reflectancia para diferentes espesores que abarcaran dicho rango. Por ello se seleccionaron recubrimientos de 5 nm, 15 nm, 25 nm, 50 nm, 80 nm y 100 nm. Estos valores no responden a los espesores reales, sino que son aproximaciones a los valores medios obtenidos durante la simulación, en aras de simplificar la forma de referenciarlos.

Para cada uno de estos espesores se repitió el experimento en 20 ocasiones para contar con una estadística y analizar el comportamiento de las magnitudes como rugosidad y espesor que fluctuaban cada vez que se realizaba una simulación. El criterio de 20 repeticiones estuvo determinado por la fluctuación de la desviación estándar para estos parámetros cuando esta comenzó a variar en el orden del 1%.

Como valores de temperatura del sustrato se seleccionaron dos valores característicos de 25 °C (T0) y de 73.5 °C (T1). Estos fueron fijados, el primero para tener una condición de referencia y el segundo porque representa el límite de temperatura a la cual se lleva a cabo una deposición de aluminio sobre PC. Si bien es cierto que en nuestro caso el sustrato fue un material cerámico que permite valores de temperaturas elevados, pretendimos solo analizar un intervalo razonable en congruencia con la práctica.

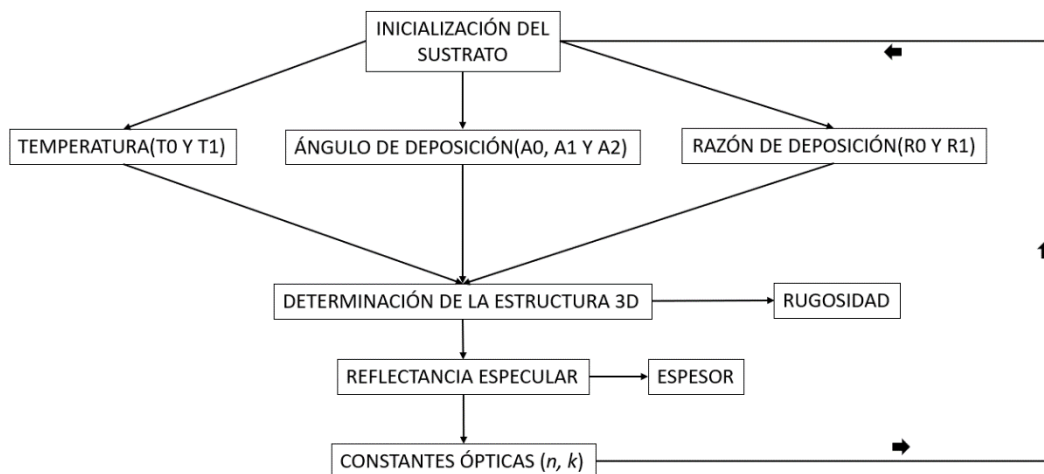
Los ángulos de deposición se seleccionaron basados en la literatura y las prestaciones de los equipos comerciales. Se estableció una incidencia normal a la superficie para la deposición en primera instancia (A0), luego bajo un ángulo de 30° (A1) y por último bajo 45° (A2).

Igualmente se seleccionaron dos velocidades para llevar a cabo la deposición, una de 0.404 nm/s (R1) y otra de 0.242 nm/s (R2).

Con esta cantidad de parámetros se tendrían 60 *muestras* para analizar cómo cada una de las variables antes mencionadas afectaban a la reflectancia final de nuestro

sistema. Esto junto a la cantidad de repeticiones realizadas suma un total de 1200 experimentos virtuales que fueron llevados a cabo. Los tiempos de compilación para los recubrimientos de 100 nm alcanzaron valores superiores a las 8 horas de cómputo para cada condición experimental.

En la **Figura 13** se muestra un esquema de metodológico de la experimentación.



**Figura 13.** Esquema de la metodología experimental llevada a cabo en este trabajo investigativo.



## CAPÍTULO III

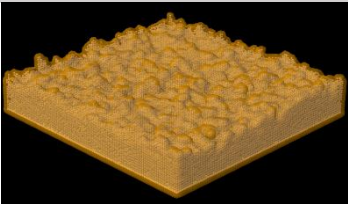
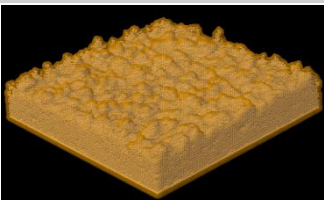
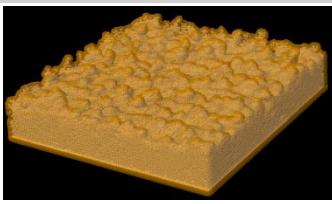
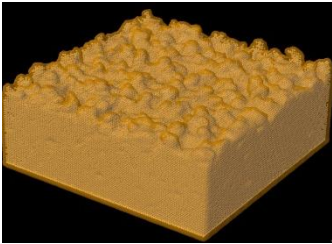
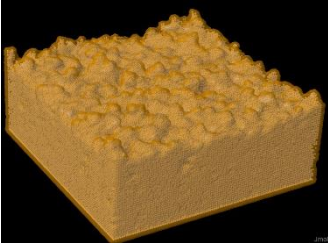
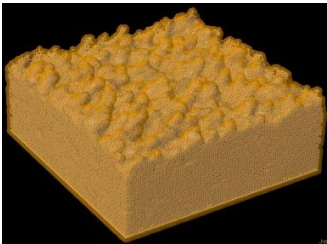
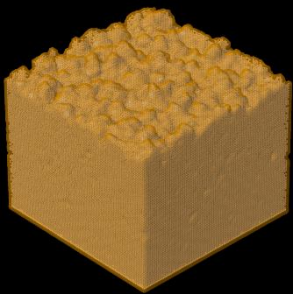
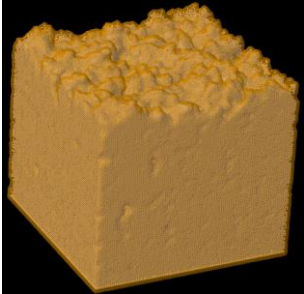
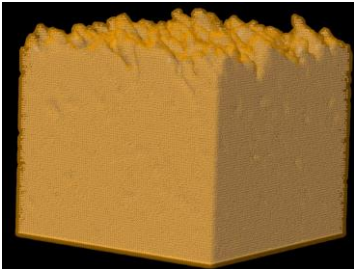
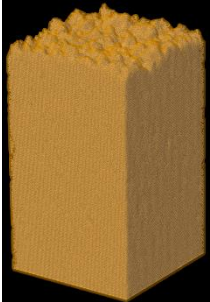
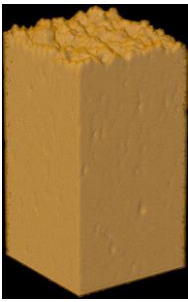
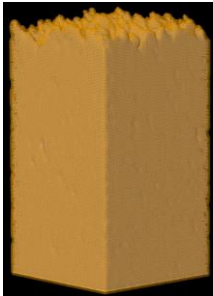
### RESULTADOS Y DISCUSIÓN

---

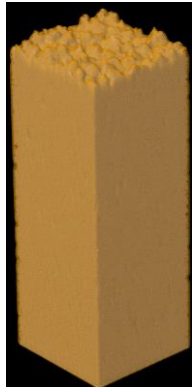
En este Capítulo se presentarán los resultados que se obtuvieron de las simulaciones realizadas, así como se discutirá el comportamiento observado en relación a lo reportado en la literatura especializada. La meta a cumplir durante esta sección es esclarecer y brindar con resultados a los objetivos específicos que nos trazamos, ello para lograr una comprensión sobre el comportamiento óptico de los recubrimientos de aluminio sobre  $\text{SiO}_2$ .

#### **1. Estructura 3D de los recubrimientos para las diferentes condiciones experimentales.**

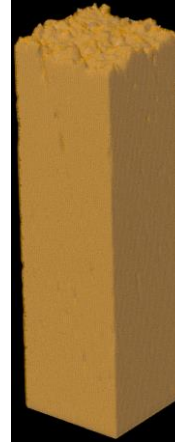
Para obtener las estructuras de cada configuración de trabajo fue preciso conocer las condiciones bajo las cuales se llevaría a cabo el proceso de experimentación. Una condición fue que el sustrato fuera siempre el mismo, para ello se procedió a establecer las condiciones dentro del *software*; el sustrato seleccionado fue el  $\text{SiO}_2$  con una estructura cristalina cúbica y con un espesor de 15 nm. El tamaño del sustrato fue definido como  $(40.4 \times 40.4 \times 15) \text{ nm}^3$ . Se estableció una energía media para los átomos de aluminio que se depositaban de 0.1 eV [79]. Los resultados se muestran en las imágenes que se observan en la **Figura 14**. Aquí se observan las imágenes para cada espesor de las condiciones T1A0R0, T1A1R0 y T1A2R0 que se obtuvieron en la simulación. Se reportan los espesores con los correspondientes valores de desviación estándar.

Espesores	T1A0R0	T1A1R0	T1A2R0
5.33±0.17 nm			
11.60±0.28 nm			
24.98±0.35 nm			
52.59±0.28 nm			

**83.46±0.33  
nm**



**99.60±0.42  
nm**



**Figura 14** Estructura morfológica 3D de los recubrimientos de aluminio sobre SiO<sub>2</sub> para las condiciones de T1R0 y variando los ángulos de deposición en 0°, 30° y 45° con respecto a la normal incidente a la superficie.

Esta etapa del experimento es necesaria, pues a través de ella es posible determinar el espesor promedio de los recubrimientos y su rugosidad superficial. Para cada condición de la experimentación se realizaron 20 simulaciones, este criterio fue basado en la observación de la fluctuación en la desviación estándar para los espesores y para la rugosidad, que será analizada más adelante. Con 20 iteraciones la desviación estándar comenzaba a variar solo en el lugar de las centenas decimales por lo que para nuestro estudio ya comenzaba dejar de ser significativa esas pequeñas variaciones.

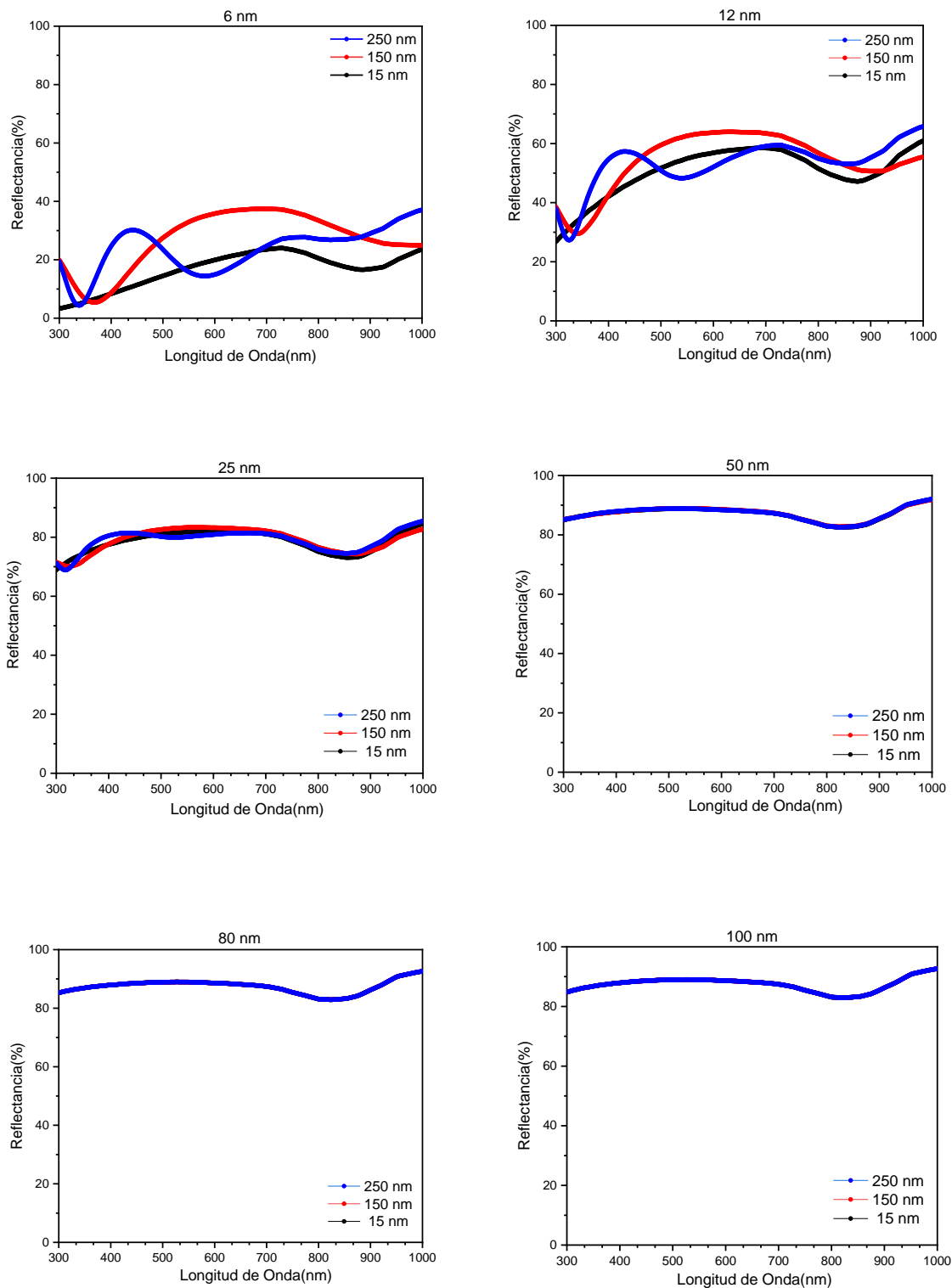
En las figuras correspondientes a los recubrimientos para las condiciones T1A0R0, T1A1R0 y T1A2R0 el aspecto a destacar es la marcada influencia del ángulo de deposición sobre la perfilometría de la rugosidad, marcando una tendencia en

cuanto orientación de la superficie según el ángulo bajo el cual se llevó la deposición.

La cantidad de átomos a depositar y el ángulo bajo el cual estos eran depositados, determinaba los espesores de los recubrimientos, estos fueron desde 100 000 átomos para el caso de los recubrimientos de 5.33 nm hasta dos millones quinientos mil átomos, para los recubrimientos de 99.6 nm. Estos espesores fueron seleccionados lo más cercanos posibles a la cifra entera más próxima a los valores reportados en la **Figura 14**.

## **2. Estudio sobre la influencia del espesor del sustrato sobre la reflectancia.**

La deposición de la capa semilla, como se mencionó anteriormente, tiene como la principal función mejorar la adhesión de los átomos de aluminio sobre el policarbonato, este es uno de los métodos más comunes para funcionalizar la superficie del polímero [9]. En F. Alder *et al.* se reporta que el espesor óptimo de trabajo para esta capa debía ser de 15 nm [80]. En nuestro estudio se respetó este resultado, para tener condiciones similares de experimentación y así poder comparar algunos resultados que sean de interés. Según F. Alder planteó, este espesor resultó poseer los mejores valores de adhesividad, para el aluminizado, que fueron más idóneos que para otros espesores. En nuestro trabajo nos dimos a la tarea de analizar si para nuestras dimensiones de aluminizado, este valor de espesor para la capa semilla influiría sobre la reflectancia final del sistema. Por ello en la **Figura 15** se muestra el comportamiento de la reflectancia para diferentes espesores de la capa semilla, en las condiciones T1A0R0 y su comportamiento para cada espesor atendiendo al recubrimiento de aluminio empleado.



**Figura 15** Evolución de la reflectancia en función del espesor del sustrato para la condición T1A0R0.

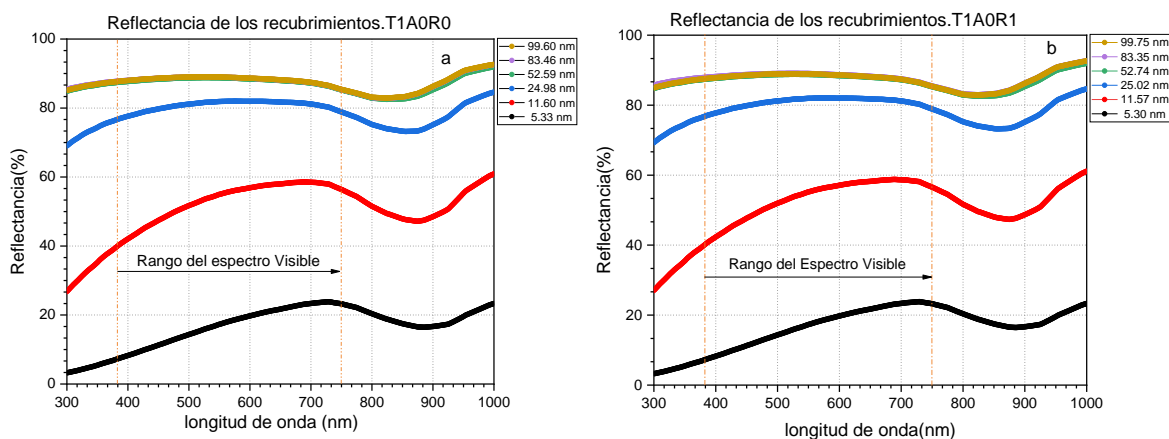
La **Figura 15** brinda la información que para los espesores del aluminizados menores a 52.59 nm, en los que el espesor que posea el sustrato va a influir fuertemente sobre la reflectancia, mientras que para espesores mayores ya no se observa ese comportamiento. Esto sucede pues para valores menores a los 52.59 nm en la capa de aluminio, la componente de la luz transmitida es considerable y puede existir un reforzamiento constructivo en cuanto la intensidad de la onda electromagnética que es reflejada en la superficie y la que es reflejada por el sustrato. Además, que cercano a ese valor de espesor, 52.59 nm en el recubrimiento, ya la componente de la transmitancia es casi nula por lo que el material solo absorberá radiación en un por ciento y la reflejará la mayor parte de esta.

En el artículo de F. Alder y *col.* este tipo de estudio no se hace. Solo se muestra los resultados de la adhesión del aluminio sobre el sustrato. Mientras en nuestro trabajo si se observó como para los espesores menores a 52.59 nm el espesor de esa capa semilla tiene un papel fundamental para la reflectancia del sistema. Por lo que para recubrimientos nanométricos por debajo de ese valor y en aplicaciones que se busque aumentar la reflectancia en el visible, es recomendable trabajar con espesores de 150 nm, ya que esos mostraron un mejor comportamiento de la reflectancia, que otros espesores del sustrato.

### **3. Influencia de la velocidad de deposición (R) sobre la reflectancia.**

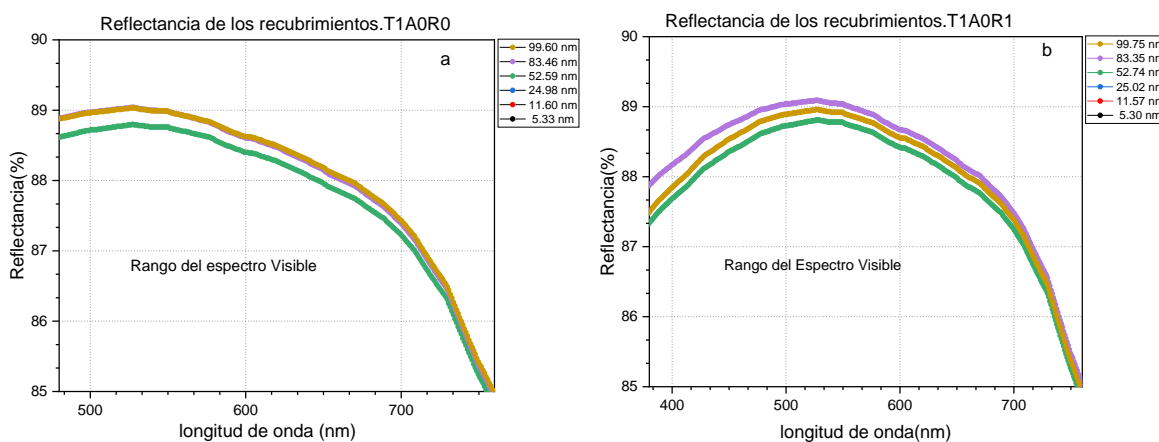
Como se mencionó en Capítulo I, la relación entre la velocidad a la cual se depositan los átomos mediante la técnica de *sputtering* influye fuertemente en el proceso de la creación de los núcleos que sirven como iniciadores en el crecimiento de la capa atómica cuando es llevado a cabo el proceso de deposición. La velocidad a la cual se deposite influye sobre cómo se va formando esas capas atómicas y cómo se va comportando desde la rugosidad hasta la porosidad que pueda existir. Estos factores hacen que cambien las condiciones tanto morfológicas como estructurales por lo que pueden afectar la capacidad de reflejar la radiación incidente atendiendo a la velocidad a la que se deposita el material [81].

En la **Figura 16** se observa cómo cambia la reflectancia cuando se consideran dos velocidades diferentes de deposición.



**Figura 16** Reflectancia para los diferentes recubrimientos variando la velocidad de deposición. (a)  $R0=0.240$  nm/s, (b)  $R1=0.404$  nm/s.

En la **Figura 16** se observa el comportamiento de la reflectancia y como esta cambia al modificar la razón de deposición. En esta, **Figura 16**, no es posible apreciar de forma cuantitativa si más allá de la modificación, que sufrieron los espesores de los recubrimientos, apareció algún cambio notable en la reflectancia, en la **Figura 17**, se hace un aumento a la zona del rango correspondiente al visible para los recubrimientos que presentaron mejores valores en la reflectancia.



**Figura 17** Detalle del rango correspondiente al visible para las curvas de reflectancia de las muestras a) T1A0R0 y b) T1A0R1 respectivamente.

Como se puede apreciar en la **Figura 17** para la curva de reflectancia bajo las condiciones de T1A0R0, las curvas correspondiente a los valores de 83.46 nm y la de 99.60 nm, de los recubrimientos, prácticamente están superpuestas, lo que nos brinda la información de que no existe un cambio en cuanto al valor de la reflectancia cuando el espesor de la muestra supera los 80 nm. En la segunda imagen de la **Figura 17**, podemos observar cómo al introducir un nuevo valor para la velocidad de deposición observamos un cambio, cuanto menos claro, de la diferencia entre los valores de reflectancia para los espesores correspondiente al intervalo de los 80 nm comparado con el espesor cercano a los 100 nm. Este efecto es reportado por [80] donde exponen que para un espesor de 80 nm se debe obtener el mayor valor de la reflectancia en recubrimiento de aluminio. Aunque el espesor varió unas decenas de Angstroms, no consideramos que el factor por el cual ocurrió esta modificación haya sido por el cambio de espesor, sino que está más relacionado con factores dispersivos debido al cambio del empaquetamiento de los átomos en la superficie final del recubrimiento. Este aumento provoca, según se reporta en [75], un incremento de la cantidad de núcleos por unidad de área que posteriormente conformarán la estructura de una capa en el recubrimiento, este hecho hace que la superficie sean más suaves topológicamente por lo que puede contribuir al incremento de la reflectancia.

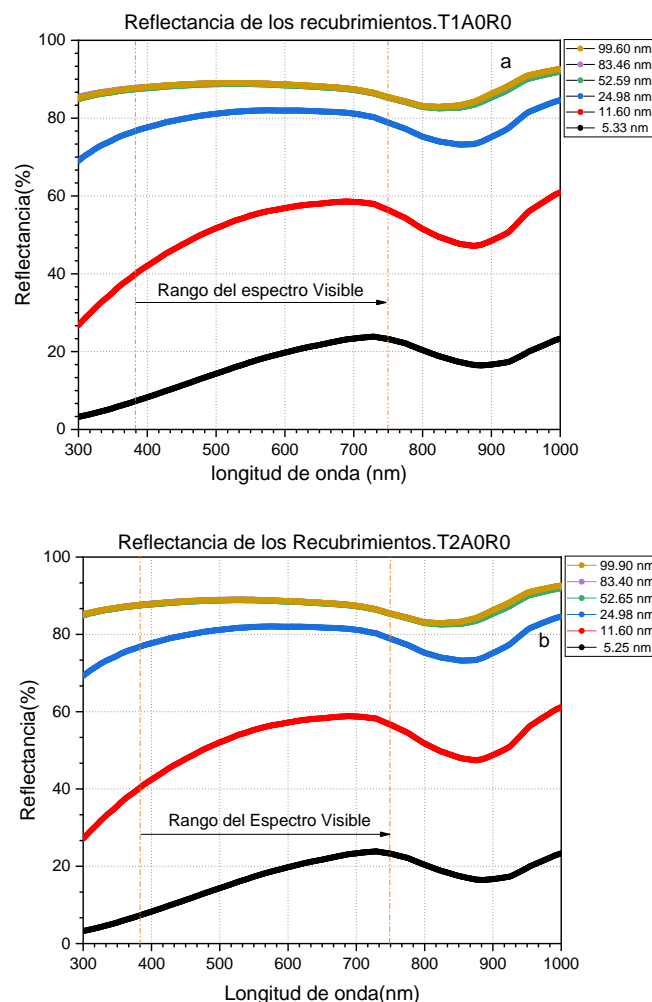
#### **4. Efecto del cambio de temperatura, en el sustrato, sobre la reflectancia.**

Es nuestro trabajo decidimos hacer las deposiciones a dos temperaturas diferentes. En el Capítulo I se reportó como influye la temperatura sobre la formación de las estructuras que dan origen a los granos en el caso de que exista la formación de una estructura cristalina. La razón de la temperatura de fusión del material que se deposita y la que tenga el sustrato, define regiones en los diagramas de los modelos de zonas los cuales según esta relación predice el comportamiento de la morfología. En este trabajo, aunque el sustrato fue SiO<sub>2</sub> asumimos para el cálculo de la temperatura máxima a la cual sería llevada a cabo la deposición como si fuera el policarbonato, para estar cerca de lo que realmente sucede en la industria. El



polycarbonato presenta una  $T_g=147^\circ\text{C}$ , la temperatura de fusión del aluminio es  $T_f=660^\circ\text{C}$  por lo que, para garantizar al menos, en caso se forme alguna estructura cristalina, el inicio de la formación de granos en forma columnar se necesita que la temperatura del sustrato se de  $73.5^\circ\text{C}$ . Eso nos garantiza de que la deposición se lleve a cabo de tal suerte que se forme una estructura cristalina, nos encontraríamos entre la zona 2 y la zona T del Diagrama del Modelo de Zona [82].

Es por ello que se seleccionaron dos temperaturas extremas a las que normalmente se realizan estas deposiciones,  $25^\circ\text{C}$  como cota inferior y  $73.5^\circ\text{C}$  como la superior. La **Figura 18** muestra cual fue el efecto que tuvo este cambio de temperatura sobre nuestra variable de estudio, la reflectancia.



**Figura 18.** Efecto de la temperatura del sustrato sobre la reflectancia a)T1A0R0 y b)T2A0R0.

En este caso no se puede observar algún cambio de interés en los valores de la reflectancia con el cambio de la temperatura del sustrato. En la **Tabla 1** y de manera cuantitativa se exponen los cambios que se produjeron en la reflectancia por la influencia del aumento de la temperatura para una longitud de onda de 550 nm.

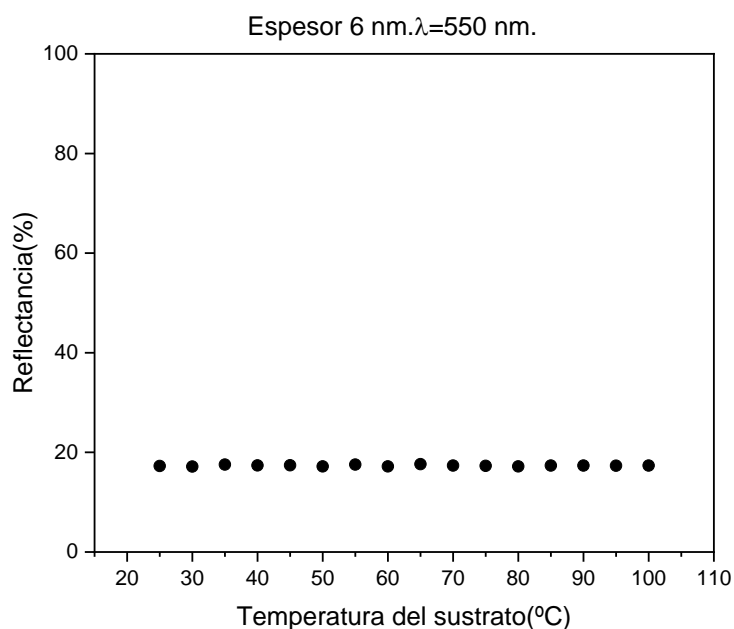
**Tabla 1.** Valores de reflectancia para cada recubrimiento a diferentes temperaturas del sustrato para una longitud de onda de 550 nm.

Condiciones	Intervalo de los espesores en los recubrimientos						Reflectancia (%)
	5-6 nm	11-12 nm	24-25 nm	52-53 nm	83-84 nm	99-100 nm	
T1A0R0	17.26	55.17	81.94	88.78	89.04	88.92	
T2A0R0	17.26	55.25	81.93	88.80	88.96	88.93	

Como se aprecia en la **Tabla 1**, la reflectancia no experimenta ningún cambio considerable y además se mantiene que los espesores con mayor capacidad para reflejar la radiación incidente son los correspondientes al intervalo de 83-84 nm. En este caso para el intervalo de temperatura que se seleccionó, en términos de energía no es lo suficiente relevante como para lograr un cambio significativo en la reflectancia del recubrimiento. Otro factor pudiera ser que, aunque se está depositando átomos de aluminio no se forme una estructura cristalina definida y lo que se tenga sea un recubrimiento amorfo, por lo que este cambio de temperatura no tiene que condicionar una variación en la reflectancia superficial final del sistema. Esto ha sido reportado en comportamientos de capas delgadas de oro sobre SiO<sub>2</sub> en escala nanométrica, por Lawrence L. Kazmerski en su libro sobre dispositivos base capas delgadas de materiales amorfos y policristalinos [83].

Puesto que no se apreciaron cambios significativos, un análisis más completo sería el de ver como evoluciona para un recubrimiento, si, la temperatura fluctuara en un rango más amplio y a intervalos equiespaciados.

En la **Figura 19** se ilustra el comportamiento de la reflectancia para los recubrimientos correspondiente al rango de los 6 nm espesor. Se puede apreciar de la temperatura no afectó el comportamiento de la reflectancia; la dispersión de los puntos nos habla acerca de una no correlación entre estos dos aspectos, además la fluctuación en la reflectancia, para un rango amplio de temperaturas fue solo del 0.6%, por lo que podemos afirmar que la temperatura del sustrato no es un factor que afecte la reflectancia superficial en nuestro sistema.

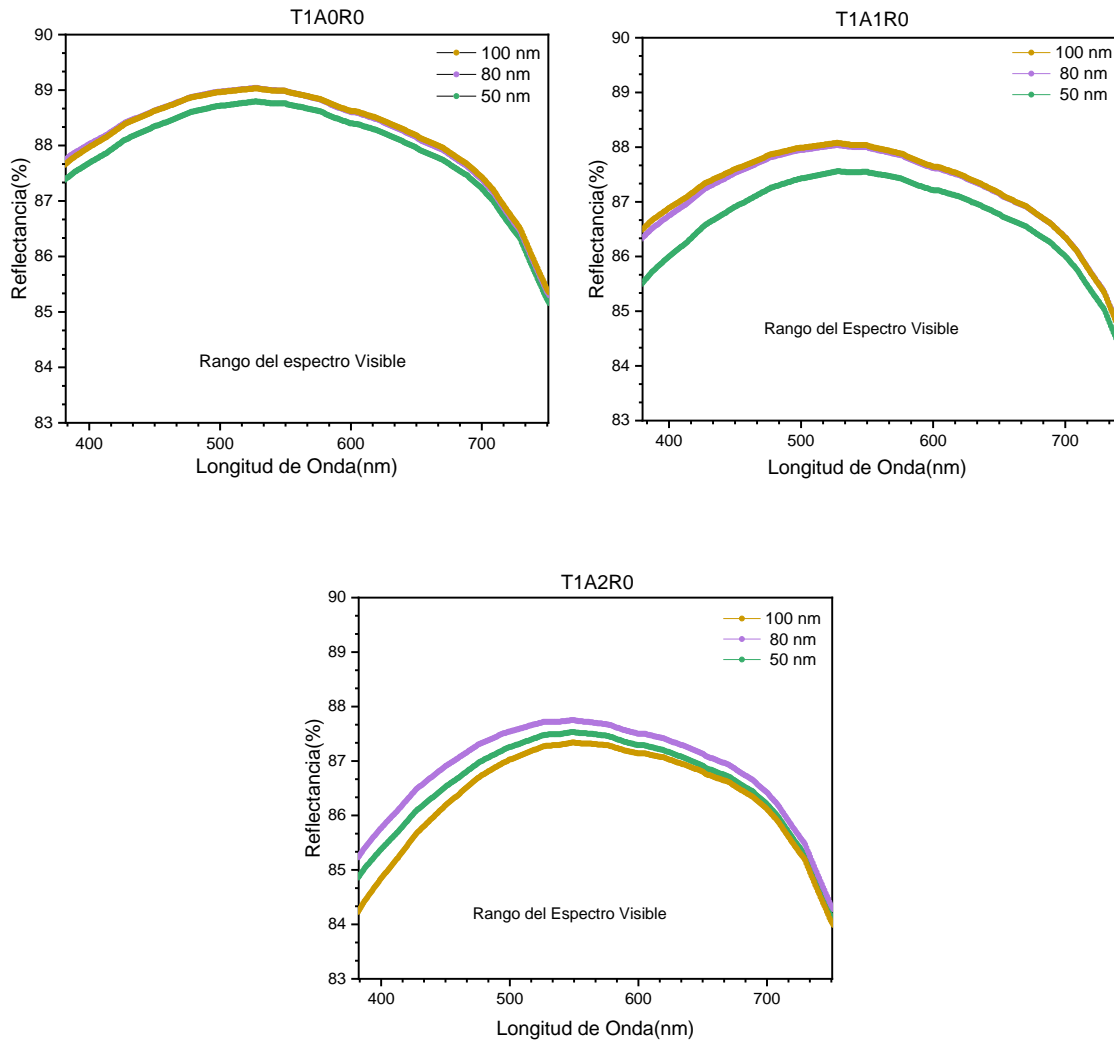


**Figura 19** Reflectancia en función de la temperatura del sustrato.

## 5. Cambio en la reflectancia producto a la variación del ángulo de deposición.

Para el desarrollado en nuestro trabajo uno de los factores en el que más claramente se pudo observar una influencia sobre la reflectancia del sistema fue bajo las variaciones del ángulo de deposición.

En la **Figura 20** se presenta una sección de las curvas de reflectancia para las condiciones T1A0R0, T1A1R0 y T1A2R0 en la región del espectro visible. Es apreciable que a medida que se incrementó el ángulo de deposición la reflectancia fue disminuyendo y es más acentuada la diferencia entre los valores de estas.



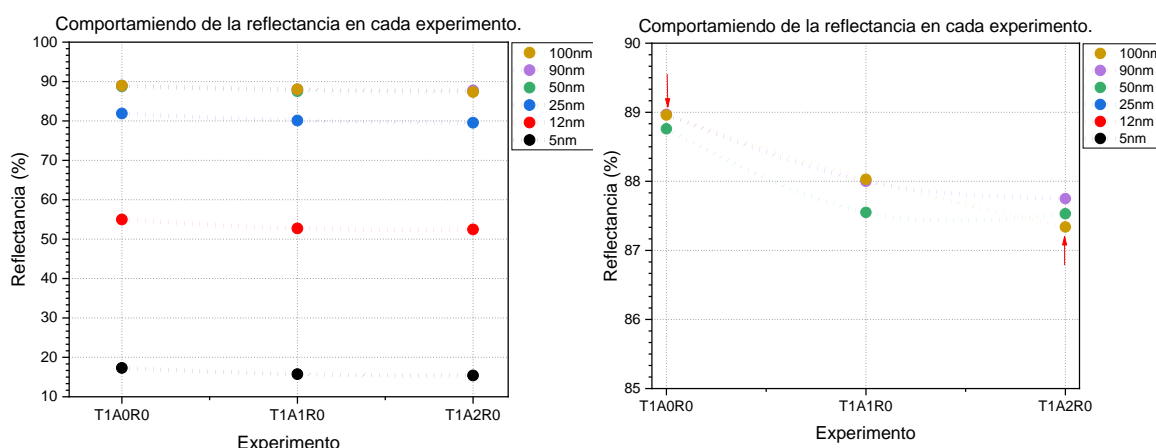
**Figura 20** Cambio en la reflectancia producto al ángulo de deposición. a) 0°, b) 30° y c) 45°.

Es apreciable que a medida que el ángulo fue en aumento la reflectancia fue disminuyendo y a su vez fue más claro el discernir los valores correspondientes para los recubrimientos de los intervalos de 50 nm, 80 nm y 100nm de espesor. En el trabajo reportado por Xi *et al.* [84] se explica que este tipo de comportamiento puede suceder por un aumento en la densidad del camino óptico, el hecho de que exista como se apreció en la **Figura 14**, una oblicuidad marcada en la superficie a medida que el ángulo de deposición se incrementa, hace que la onda electromagnética del haz incidente tenga que interaccionar con un mayor número

de átomos antes de interaccionar con la superficie, por lo que la capacidad de reflejar de esa superficie más oblicua, disminuye.

Aunque para los valores correspondiente en la medición de T1A0R0 no es posible encontrar una diferencia apreciable de la reflectancia para los recubrimientos correspondientes al intervalo de los 80 y 100 nm, si se observa para cuando el ángulo fue de 45°, en este caso, T1A2R0, se repite el comportamiento de que el recubrimiento correspondiente al intervalo de los 80 nm posee mayor valor de reflectancia que el de 100 nm. Como se había mencionado anteriormente, aunque ya en este experimento la reflectancia es menor que en la del experimento T1A0R0.

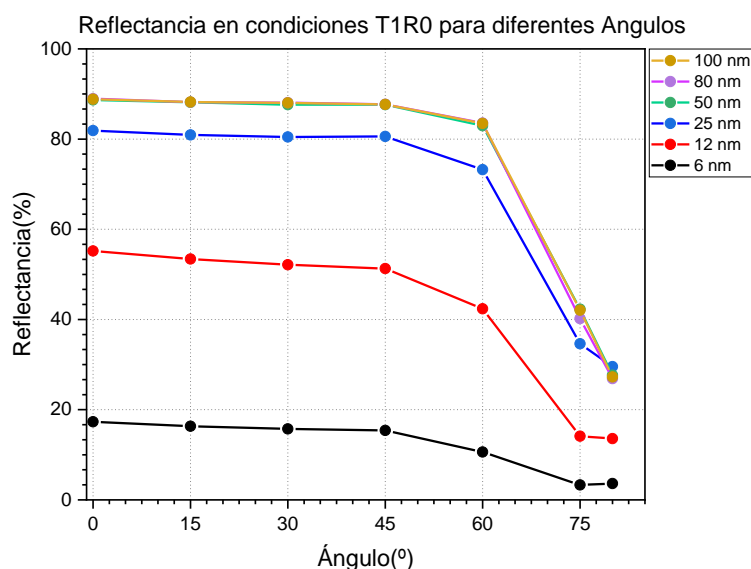
En la **Figura 21** se muestra este comportamiento de manera más cuantitativa, en la gráfica se observa una tendencia a disminuir para cada experimento la reflectancia a medida que el ángulo de deposición fue en aumento para una longitud de onda de 550.35 nm.



**Figura 21** Disminución de la reflectancia en los experimentos donde se varió el ángulo de deposición.

De igual forma que en el sub epígrafe anterior nos planteamos hacer para un análisis más amplio de cómo variar el ángulo de deposición, en caso de que en la práctica esto sea posible, influiría sobre la reflectancia. Para ello se llevó a cabo la experimentación para cada espesor bajo las condiciones de T1R0 y para los ángulos de 0°, 15°, 30°, 45°, 60°, 75° y 80°. De esta manera podríamos decir con mayor seguridad cómo esta variable cambia la reflectancia. En la **Figura 22** se muestra la tendencia del comportamiento de disminución de la reflectancia a medida

que el ángulo de deposición aumenta. Esta gráfica refleja la preferencia a la perpendicularidad sobre las estructuras que conforman la rugosidad superficial, para que el sistema experimente un máximo en su reflectancia. Alcanzándose siempre los mayores valores de reflectancia para cada espesor bajo  $0^\circ$ . Además, se observa en dicha figura, que los valores de la reflectancia decaen abruptamente para ángulos mayores a  $60^\circ$ , este efecto sí está estrechamente vinculado con un aumento considerable de la rugosidad superficial para este caso.



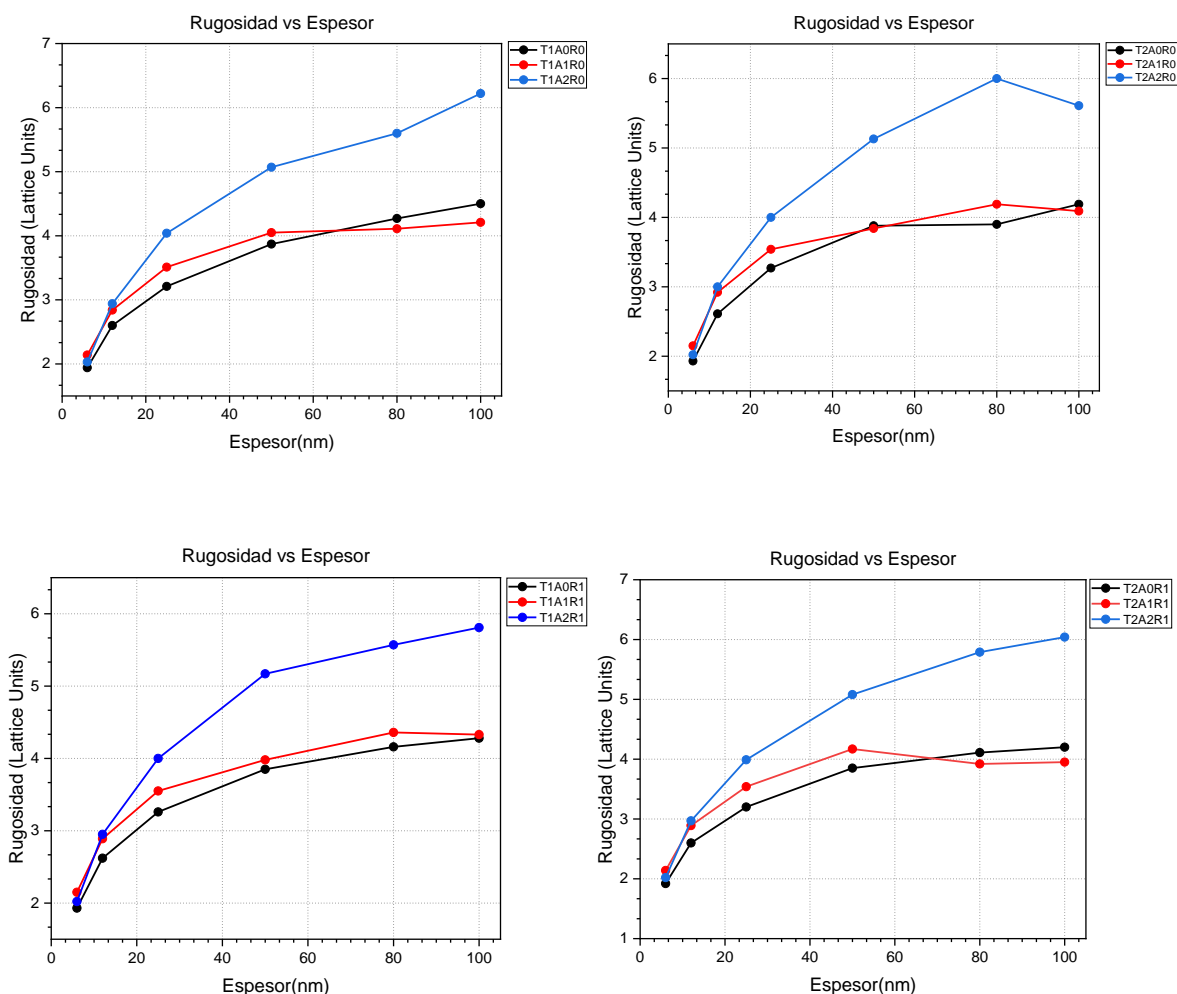
**Figura 22.** Comportamiento de la reflectancia en función del ángulo de deposición

## 6. Comportamiento de la rugosidad superficial, relación con el espesor del recubrimiento y su reflectancia.

Uno de los factores que más afectan la reflectancia de las superficies en general es la rugosidad que esta posea. Estudios demuestran que a medida que la rugosidad se encuentre más próxima al orden de la longitud de onda correspondiente al haz, que interaccionara con la superficie, esta afecta de manera negativa su capacidad de reflejar la radiación [80, 84, 85].

Es por ello que en este estudio se procedió al análisis del comportamiento de la rugosidad en la superficie, y la relación que guarda el espesor de los recubrimientos con su aumento o disminución.

En la **Figura 23** se muestra los resultados que se obtuvieron. En aras de hacer más comprensible los resultados, en las gráficas los espesores obtenidos para cada experimento son representados por un número del intervalo en el cual se encuentra el valor de la medición, el objetivo es demostrar cómo evoluciona la rugosidad a medida que fue aumentando el espesor.

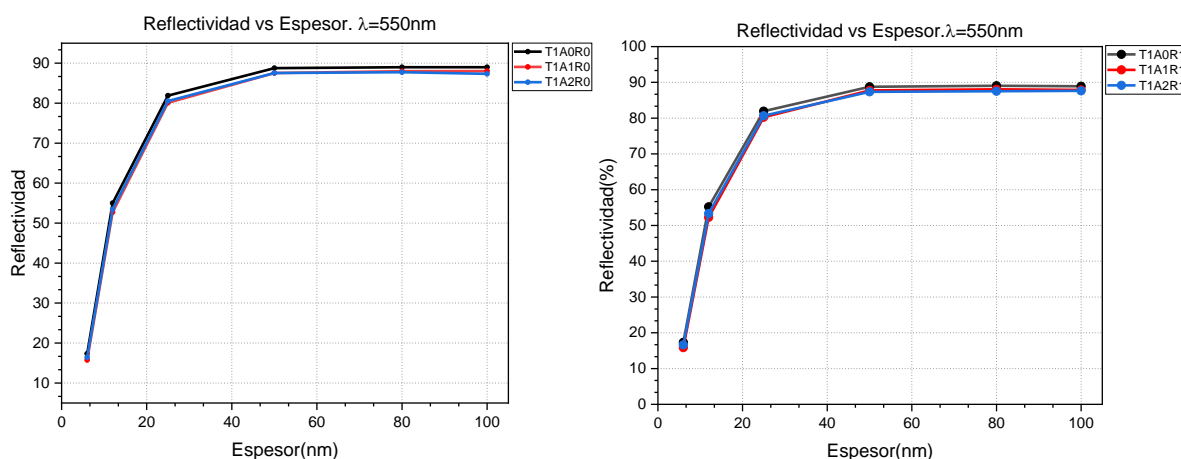


**Figura 23.** Evolución de la rugosidad con el espesor para cada experimento.

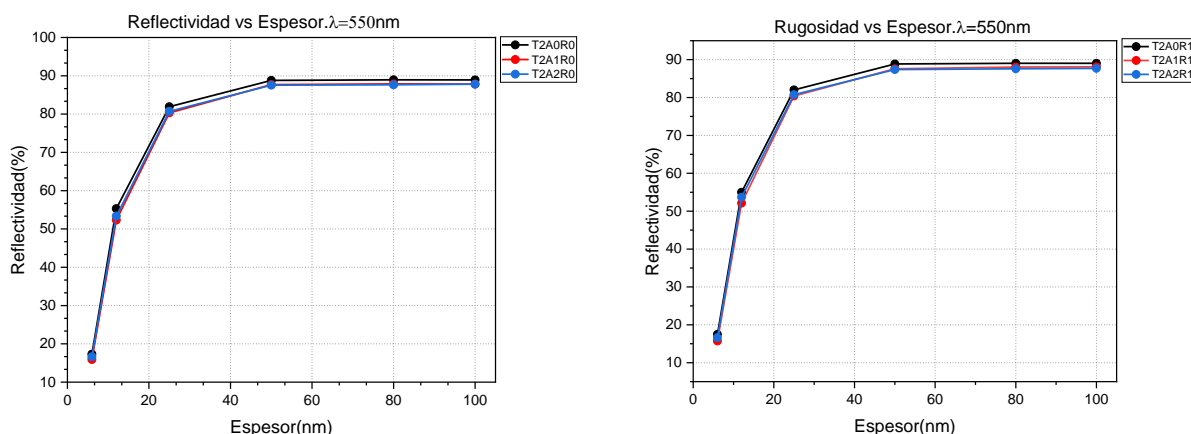
La **Figura 23** denota una marcada tendencia al aumento de la rugosidad en la medida que el espesor va aumentando. Este comportamiento obtenido es similar, al reportado en *Optical properties of thin solid films* [78]. Aunque se observa que para los recubrimientos realizados bajo los ángulos de  $0^\circ$  y  $30^\circ$  no es posible hacer un análisis más profundo producto a que el comportamiento evolucionó de manera

diferente según fueran las condiciones del experimento. Cada uno de estos valores son promedios obtenidos de 20 repeticiones para cada condición experimental y por cada espesor. Solo en los recubrimientos correspondientes a los intervalos de 80 nm y 100 nm se hicieron 10 y 5 repeticiones respectivamente, debido a los altos tiempos de compilación del programa y errores de saturación de memoria virtual que aparecieron en el momento ejecutar el programa, los tiempos de las compilaciones oscilaban desde los 5 minutos en caso de los recubrimientos de 6 nm hasta las 8 horas en caso de los mayores de 50 nm. En el **Anexo 1** se relacionan todos los valores obtenidos para los espesores y la rugosidad, así como los valores de desviación estándar para cada una de esas magnitudes.

En el mismo libro de *Heavens* [78] se muestra que para capas delgadas de aluminio la reflectancia va en ascenso hasta que satura para un espesor que oscila sobre los 80 nm, la reflectancia y el valor que se reporta para este espesor, al igual que se muestra en [80] es de 90.1% para una longitud de onda comprendida en el rango del visible, de 550 nm. Este valor fuera del espectro visible y tendiendo hacia el infrarrojo tiende a ser un poco mayor. En nuestro trabajo se obtuvo un valor y comportamiento muy similar al reportado en la literatura, como se observa en la **Figura 24**.



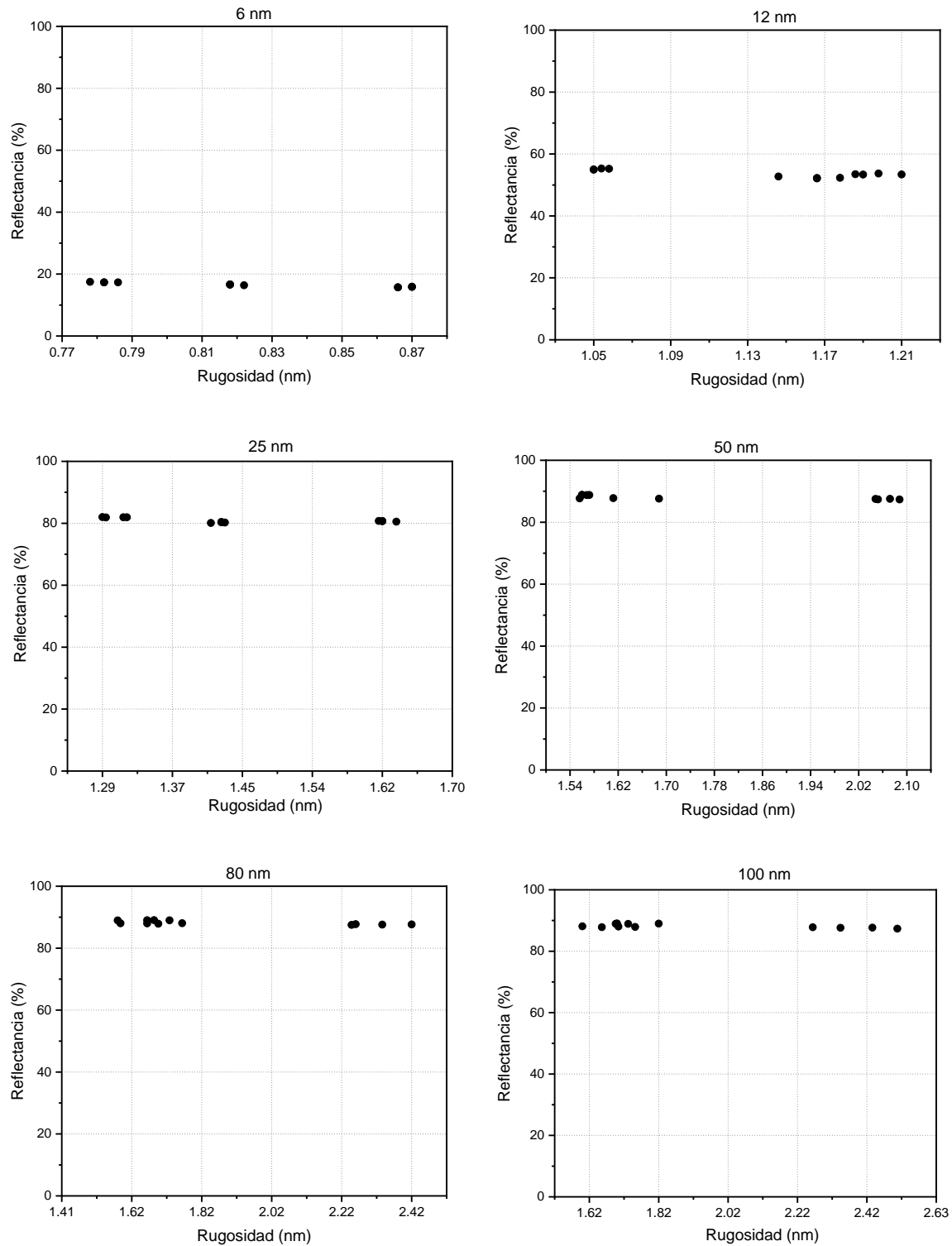




**Figura 24.** Comportamiento de la Reflectancia en función del espesor del recubrimiento.

Para nuestras condiciones, el espesor para el cual la reflectancia fue máxima considerando las condiciones de la deposición correspondía al intervalo de los 80 a 90 nm tal y como se observa en la **Figura 24**. El experimento en el que se obtuvo un mejor valor de la reflectancia fue en el de T2A0R1 y esta fue de 89.1%, muy cercano al reportado en la literatura.

En la **Figura 25** se reportan los valores de la reflectancia en función de la rugosidad superficial. El valor de rugosidad más elevado que se obtuvo fue para los recubrimientos que estaban comprendidos en los entornos cercanos a los 100 nm y este tuvo un valor de 2.5 nm y el valor mínimo de la rugosidad fue para el recubrimiento cuyo espesor rondaba los de los 6 nm y esta fue de 0.86 nm. Una vez obtenido todos los valores, analizamos que la reflectancia especular superficial no se debía de afectar por estos, ya que eran entre 3 y 4 órdenes de magnitud menores que la longitud de onda de los 550 nm, correspondiente al espectro visible, para la cual se reportan los valores, en la mayoría de la literatura especializada que reporta estudios similares a este, y por lo cual nosotros llevamos a cabo dicho análisis con esa longitud.



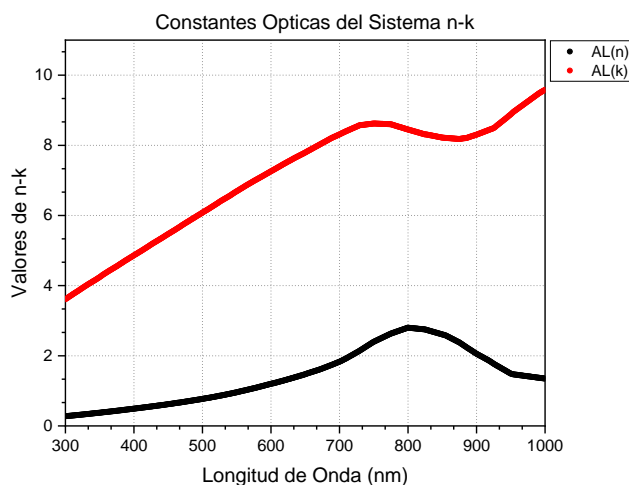
**Figura 25.** Relación entre rugosidad y reflectancia superficial para cada rango de espesor analizado. Para los valores de rugosidad reportados por el *software* según se explica en [86], se puede considerar la superficie bajo estudio como ópticamente plana. Dado que

la relación del cuadrado entre rugosidad y longitud de onda incidente es mucho menor que 1. Es por ello que en la **Figura 25** se observa un comportamiento constante de la reflectancia, aunque la rugosidad fluctúa en cada condición experimental.

## **7. Comportamiento de las constantes ópticas del sistema $n$ , $k$ en el intervalo comprendido entre los 300-1000 nm del espectro electromagnético.**

Las constantes ópticas, el índice de reflexión  $n$  y la constante de extinción  $k$ , brindan una información relevante respecto a las propiedades ópticas de un sistema. En el caso de la constante  $n$ , está relacionada con la variación de la velocidad de la luz en un medio. En el caso de la constante  $k$ , se relaciona con la capacidad de un medio para disminuir la intensidad de una onda electromagnética que interacciona con él, es decir la capacidad para disminuir la amplitud de la onda. Estas dos constantes conforman en una relación más amplia, el índice de reflexión complejo de un material [87].

La **Figura 26** muestra este comportamiento para ambas variables, denotando que los valores de la constante  $k$  son mayores que los de la constante  $n$  en todo el rango del espectro comprendido entre los 300 a los 1000 nm. Este comportamiento es característico de sólidos amorfos, por lo que se puede considerar que, aunque se está depositando átomos de aluminio sobre  $\text{SiO}_2$  estas capas no poseen una estructura cristalina definida e incluso pueden poseer propiedades dieléctricas.



**Figura 26** Valores de las constantes ópticas  $n$  y  $k$  para el sistema Al/SiO<sub>2</sub>.

En la **Figura 26** se observa que para la región comprendida entre los 700-900 nm existe un máximo local para el índice de reflexión, mientras que para la constante  $k$  se observa un valle, esto está relacionado, como se observa en las **Figura 16 y Figura 18**, con una banda de absorción óptica donde el material va a absorber más radiación en relación con lo que refleja o transmite.

En [87] se reporta la magnitud de estos valores para un rango muy amplio del espectro electromagnético. En la **Tabla 2** estableceremos una comparación entre los valores obtenidos en nuestra simulación y los reportados en la literatura.

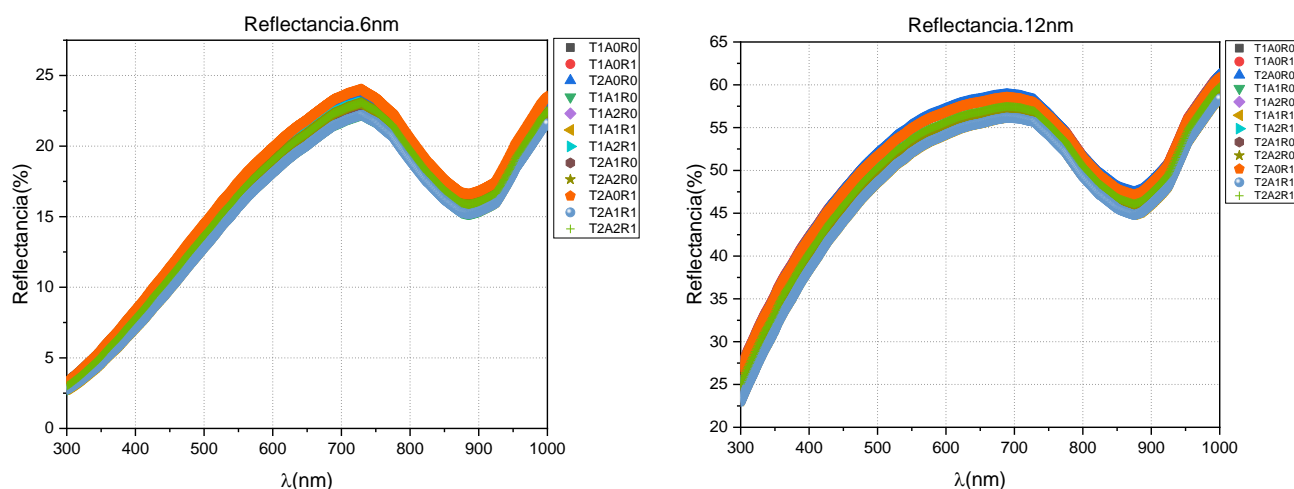
**Tabla 2** Comparación entre los valores de  $n$  y  $k$  calculados y reportados en [14].

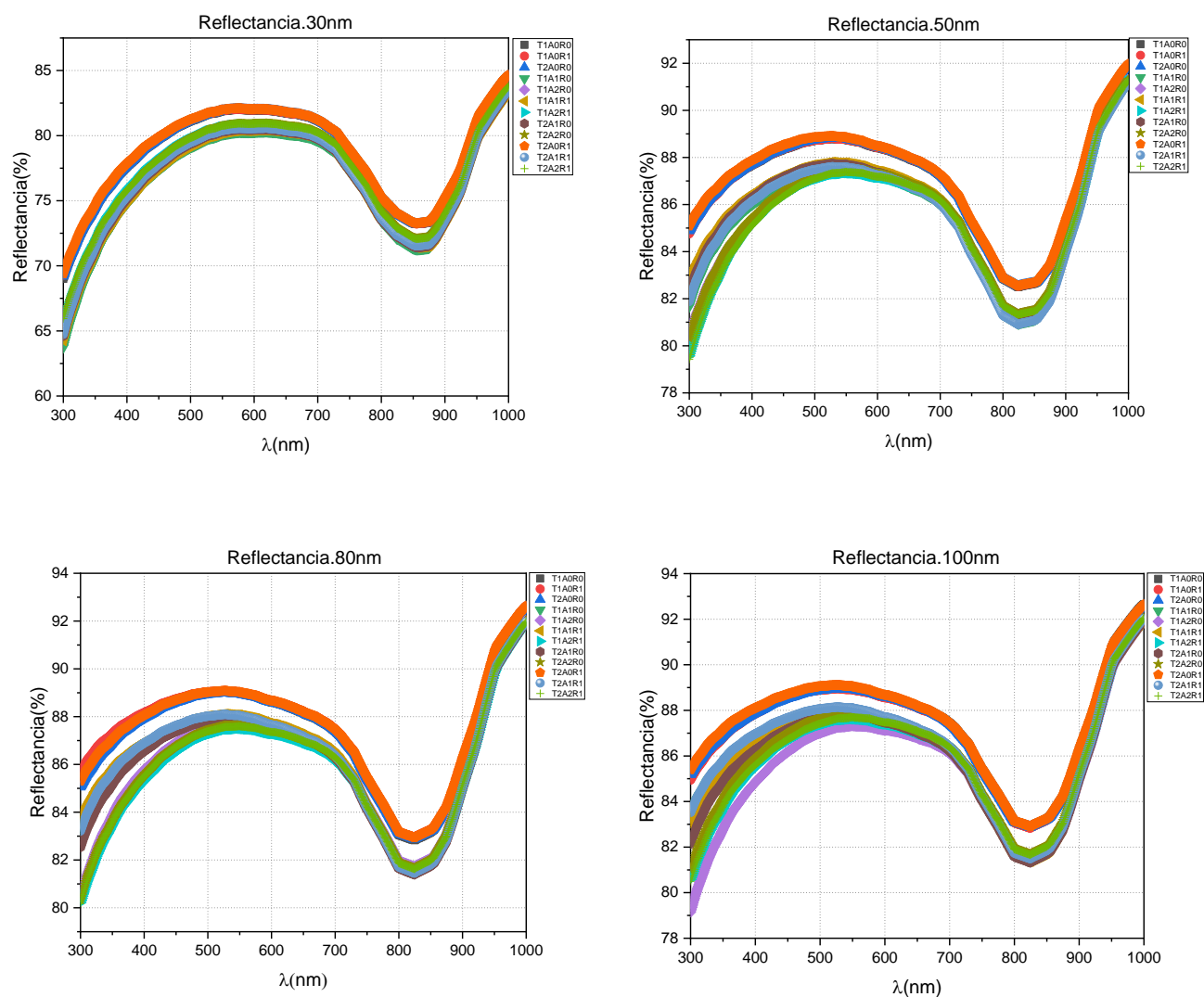
longitud de onda (nm)	$n$	$n$ [87]	$k$	$k$ [87]
400	0.490	0.490	4.862	4.860
500	0.770	0.769	6.084	6.080
600	1.201	1.200	7.263	7.260
700	1.834	1.830	8.314	8.310

Como se aprecia en la **Tabla 2** los valores obtenidos y reportados en la literatura son coincidentes en algunos casos y en otros la desviación más grande es de 0.004 por lo que podemos asegurar que nuestro modelo propuesto describe con exactitud lo que ocurre en términos prácticos.

## 8. Determinación condiciones óptimas para obtener la máxima reflectancia en el rango del espectro visible.

Para concluir con esta investigación se muestra en la **Figura 27** el comportamiento de la reflectancia para cada espesor y para cada condición para la cual se llevó a cabo la deposición. A partir de ellas se puede determinar cuáles son las mejores condiciones donde la reflectancia del sistema Al/SiO<sub>2</sub> presenta un mayor valor, en el rango del espectro visible, que es el fin que se desea como premisa para este trabajo, esto facilitará sentar las bases en una primera aproximación de la simulación sobre un sistema ya más cercano a los recubrimientos de aluminio en las *headlamps* dentro de la industria automotriz.





**Figura 27.** Curvas de reflectancia para cada espesor y condición experimental.

Como resultado del análisis de las curvas de reflectancia se obtuvo que para los espesores correspondientes entre los 80 y 90 nm, la reflectancia fue máxima en el rango del espectro visible, y bajo una longitud de onda de 550 nm, el valor de la reflectancia fue de 89.1%. Esto con las condiciones de deposición bajo un ángulo de  $0^\circ$  y a una velocidad de 0.404 nm/s.

## CAPÍTULO IV

### CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

---

#### Conclusiones

- Se implementó la simulación mediante el método de Monte Carlo Cinético usando el *software* NASCAM para estudiar las propiedades ópticas y morfológicas de recubrimientos de aluminio sobre óxido de silicio.
- Se obtuvo la estructura morfológica del recubrimiento de aluminio para los diferentes espesores estudiados.
- Se comprobó que los factores como el ángulo de deposición y la velocidad de deposición afectan la reflectancia del recubrimiento, no así la temperatura del sustrato.
- Se demuestra que para los recubrimientos menores de 50 nm el espesor del sustrato afecta la reflectancia, siendo 150 nm el espesor óptimo del sustrato para el cual se alcanza un máximo en la reflectancia en el rango visible.
- Se comprobó que el espesor mínimo del recubrimiento para el cual la reflectancia en el espectro visible, es máxima, fue el de 80 nm.
- Se verificó que para el sistema en estudio la rugosidad no afecta a los valores de la reflectancia, puesto que esta llegó a ser hasta cuatro órdenes de magnitud menor que la longitud de onda con la cual se analizaron los recubrimientos.
- Se pudo observar una tendencia de aumento de la rugosidad a medida que los espesores de los recubrimientos fueron aumentando.
- Se comprueba la existencia de una relación entre espesor de la muestra y la reflectancia.
- Se obtuvo un valor máximo de la reflectancia de 89.1% para un espesor de 80 nm bajo las condiciones A0R1, la temperatura no afecta este valor.

## **Recomendaciones**

- Es deseable hacer una investigación similar a esta pero que se realicen recubrimientos sobre sustratos poliméricos.
- Lograr implementar en escala real este tipo de simulación para predecir comportamientos de la reflectancia en procesos de aluminizados industriales para faros de automóviles.
- Hacer uso de programas mediante simulación de elementos finitos que generen la geometría específica sobre la cual se lleva a cabo el proceso de deposición e incorporarlo a la simulación.
- Analizar como influiría la modificación del nivel de vacío sobre la reflectancia en estos sistemas.



## REFERENCIAS

---

1. OMS. *Accidentes de tránsito*. 2018 [cited 2020 3/11/2020]; Available from: <https://www.who.int/es/news-room/fact-sheets/detail/road-traffic-injuries>.
2. ArcGIS. *Analyzing traffic accidents in space and time*. 2010 [cited 2020 3/11/2020]; Available from: <https://www.arcgis.com/apps/Cascade/index.html?appid=9a27635635c940539b96fb5ef954e4d5>.
3. Dewar, R.E., P.L. Olson, and J. Gerson, *Human factors in traffic safety*. 2007.
4. Janoff, M.S.J.T.r.r., *Effect of bridge lighting on nighttime traffic safety*. 1988. **1172**: p. 88-92.
5. Götz, M. and M. Kleinkes. *Headlamps for light based driver assistance*. in *Optical Sensors 2008*. 2008. International Society for Optics and Photonics.
6. Agency, I.E. *Light's labour's lost: policies for energy-efficient lighting*. 2018 [cited 2020 1/29/2020]; International Energy Agency.]. Available from: <https://webstore.iea.org/world-energy-balances-2018-overview>.
7. Environment, U. *Accelerating the Global Adoption of ENERGY-EFFICIENT LIGHTING*. 2018 [cited 2020; Available from: [http://wedocs.unep.org/bitstream/handle/20.500.11822/20406/Energy\\_efficient\\_lighting.pdf](http://wedocs.unep.org/bitstream/handle/20.500.11822/20406/Energy_efficient_lighting.pdf).
8. Lorenz, L., T. Erlbacher, and O. Hilt, *Future technology trends*, in *Wide Bandgap Power Semiconductor Packaging*. 2018, Elsevier. p. 3-53.
9. Mwema, F.M., et al., *Properties of physically deposited thin aluminium film coatings: A review*. 2018. **747**: p. 306-323.
10. Anderson, C.D. and J. Anderson, *Electric and hybrid cars: A history*. 2010: McFarland.
11. Kumar, V.P., R. Lakkumanan, and K.J.P.o.t.I.o.M.E. Prakasan, Part D: Journal of Automobile Engineering, *Computer aided optical design of reflectors in automotive headlights*. 2006. **220**(4): p. 415-424.
12. Mace, D., et al., *Countermeasures for reducing the effects of headlight glare*. 2001.
13. Mires, R.J.J.o.F.S., *Magnetic Identification of Headlight Glass*. 1986. **31**(3): p. 913-919.
14. Linda, P., *Headlights for Automobiles*. 1970, SAE Technical Paper.
15. Nelson, J.J.T.o.t.I.E.S., *Automobile Headlamps: The ISO-CIE International Tests and Their Influence on Meeting Beam Design*. 1957. **22**(6\_IEStrans): p. 141-163.
16. Chao, Y.J.B.T. and Research, *World Forum for Harmonization of Vehicle Regulations and its Administered Agreements [J]*. 2008. **6**.

17. Schoettle, B., *Market-weighted trends in the design attributes of headlamps in the US*. 2007, University of Michigan, Ann Arbor, Transportation Research Institute.
18. Mortimer, R.G. *Requirements for automobile exterior lighting*. in *Proceedings of Spring NAS–NRC Committee Meeting on Vision: Visual Factors in Transportation Systems*, National Academy of Sciences, National Research Council, Washington, DC. 1969.
19. Fleming, B.J.I.V.T.M., *Solid State Headlights [Automotive Electronics]*. 2008. **3**(3): p. 12-15.
20. Prakasan, K., *A product data management Framework for the design and Development of headlamps for Passenger cars*. 2009.
21. Hariharan, R., G.C. Davis, and M.B. Wisnudel, *Data storage media containing transparent polycarbonate blends*. 2005, Google Patents.
22. Lighting, G.V. *Plastic Material or Materials for Use in Optical Parts Such as Lenses and Reflex Reflectors of Motor Vehicle Lighting Devices*. 2017-01-01; Available from: [https://www.sae.org/standards/content/j576\\_196001/](https://www.sae.org/standards/content/j576_196001/).
23. Vijaya, G., et al. *Studies on nanostructure aluminium thin film coatings deposited using DC magnetron sputtering process*. in *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. 2016. IOP Publishing.
24. Fekkai, Z., N. Mustapha, and A.J.A.J.o.M.P. Hennache, *Optical, morphological and electrical properties of silver and aluminium metallization contacts for solar cells*. 2014. **3**(2): p. 45-50.
25. Levine, Z.H. and B.J.J.o.a.p. Ravel, *Identification of materials in integrated circuit interconnects using x-ray absorption near-edge spectroscopy*. 1999. **85**(1): p. 558-564.
26. Moore, D.W., *Headlamp history and harmonization*. 1998, University of Michigan, Ann Arbor, Transportation Research Institute.
27. Accidents, T.R.S.f.t.P.o. *Road Safety Factsheet*. 2018 [cited 2020 1/29/2020]; Vehicle Lighting]. Available from: <https://www.rospa.com/rospaweb/docs/advice-services/road-safety/vehicles/lighting.pdf>.
28. Cushing, D. *Enhanced optical filter design*. 2011. SPIE.
29. Arias, N. and F.J.A.S.S. Jaramillo, *Highly reflective aluminum films on polycarbonate substrates by physical vapor deposition*. 2020. **505**: p. 144596.
30. Mwema, F.M., et al., *Properties of physically deposited thin aluminium film coatings: A review*. 2018. **747**: p. 306-323.
31. O'Keefe, M. and J. Rigsbee, *The science, technology and materials applications of physical vapor deposition processes*, in *Materials and Processes for Surface and Interface Engineering*. 1995, Springer. p. 151-183.

32. Kelly, P.J. and R.D.J.V. Arnell, *Magnetron sputtering: a review of recent developments and applications*. 2000. **56**(3): p. 159-172.
33. Thornton, J.A.J.J.o.V.S. and Technology, *Magnetron sputtering: basic physics and application to cylindrical magnetrons*. 1978. **15**(2): p. 171-177.
34. Hashmi, S., *Comprehensive materials processing*. 2014: Newnes.
35. Małachowska, A., et al., *Metallisation of polycarbonates using a low pressure cold spray method*. 2018. **34**(3): p. 251-258.
36. Champagne, V.K., *The cold spray materials deposition process*. 2007: Elsevier.
37. Giraud, D., et al., *Metallization of a polymer using cold spray: application to aluminum coating of polyamide 66*. 2012: p. 21-24.
38. Ganesan, A., M. Yamada, and M.J.J.o.t.s.t. Fukumoto, *Cold spray coating deposition mechanism on the thermoplastic and thermosetting polymer substrates*. 2013. **22**(8): p. 1275-1282.
39. Petrov, I., et al., *Microstructural evolution during film growth*. 2003. **21**(5): p. S117-S128.
40. Mattox, D.M., *Handbook of physical vapor deposition (PVD) processing*. 2010: William Andrew.
41. Movchan, B. and A.J.F.M.M.-. Demchishin, *STRUCTURE AND PROPERTIES OF THICK CONDENSATES OF NICKEL, TITANIUM, TUNGSTEN, ALUMINUM OXIDES, AND ZIRCONIUM DIOXIDE IN VACUUM*. 1969.
42. Thornton, J.A.J.A.r.o.m.s., *High rate thick film growth*. 1977. **7**(1): p. 239-260.
43. Messier, R., et al., *Revised structure zone model for thin film physical structure*. 1984. **2**(2): p. 500-503.
44. Messier, R., et al., *Origin and evolution of sculptured thin films*. 2000. **18**(4): p. 1538-1545.
45. Martin, P.M., *Handbook of deposition technologies for films and coatings: science, applications and technology*. 2009: William Andrew.
46. Messier, R.F., P.D. Sunal, and V.C. Venugopal. *Evolution of sculptured thin films*. in *Engineered nanostructural films and materials*. 1999. International Society for Optics and Photonics.
47. Roy, R., et al., *Preparation-physical structure relations in SiC sputtered films*. 1984. **2**(2): p. 312-315.
48. Garcia-Ruiz, J.M., A. Lakhtakia, and R.J.S.S.T. Messier, *Does competition between growth elements eventually eliminate self-affinity?* 1992. **15**: p. 60-71.
49. Trolier-McKinstry, S. and P.J.J.o.E. Muralt, *Thin film piezoelectrics for MEMS*. 2004. **12**(1-2): p. 7-17.

50. Knepper, R.A. and R.F. Messier. *Thin film morphology at low adatom mobility*. in *Complex Mediums II: Beyond Linear Isotropic Dielectrics*. 2001. International Society for Optics and Photonics.
51. Eckstein, W., et al., *Threshold energy for sputtering and its dependence on angle of incidence*. 1993. **83**(1-2): p. 95-109.
52. Savaloni, H. and M.G.J.N. Shahraki, *A computer model for the growth of thin films in a structure zone model*. 2003. **15**(3): p. 311.
53. Ha, M.J.P.P., *Kinetic roughening in polymer thin film growth*. 2012. **34**: p. 44-48.
54. Zhao, Y.-P., et al., *Kinetic roughening in polymer film growth by vapor deposition*. 2000. **85**(15): p. 3229.
55. Evans, J., P. Thiel, and M.C.J.S.S.R. Bartelt, *Morphological evolution during epitaxial thin film growth: Formation of 2D islands and 3D mounds*. 2006. **61**(1-2): p. 1-128.
56. Müller, K.H.J.J.o.a.p., *Dependence of thin-film microstructure on deposition rate by means of a computer simulation*. 1985. **58**(7): p. 2573-2576.
57. Jullien, R. and P.J.E. Meakin, *Simple three-dimensional models for ballistic deposition with restructuring*. 1987. **4**(12): p. 1385.
58. Meakin, P., et al., *Ballistic deposition on surfaces*. 1986. **34**(6): p. 5091.
59. Vold, M.J.J.T.J.o.P.C., *Sediment volume and structure in dispersions of anisometric particles*. 1959. **63**(10): p. 1608-1612.
60. Baiod, R., et al., *Dynamical scaling of the surface of finite-density ballistic aggregation*. 1988. **38**(7): p. 3672.
61. Holmen, J.K., O.S. Hopperstad, and T.J.I.J.o.I.E. Børvik, *Influence of yield-surface shape in simulation of ballistic impact*. 2017. **108**: p. 136-146.
62. Moskovkin, P. and S.J.T.s.f. Lucas, *Computer simulations of the early-stage growth of Ge clusters at elevated temperatures on patterned Si substrate using the kinetic Monte Carlo method*. 2013. **536**: p. 313-317.
63. Lucas, S. and P.J.T.S.F. Moskovkin, *Simulation at high temperature of atomic deposition, islands coalescence, Ostwald and inverse Ostwald ripening with a general simple kinetic Monte Carlo code*. 2010. **518**(18): p. 5355-5361.
64. Laidler, K.J.J.J.o.c.E., *The development of the Arrhenius equation*. 1984. **61**(6): p. 494.
65. Antuña, J.M.M., *Métodos matemáticos de la física*. 2014: Editorial Universitaria.
66. Bejan, A. and A.D. Kraus, *Heat transfer handbook*. Vol. 1. 2003: John Wiley & Sons.
67. Russell, A. and K.L. Lee, *Structure-property relations in nonferrous metals*. 2005: John Wiley & Sons.

68. Schmauder, T. and S. Küper. *Applications of Highly Reflective Silver Coatings for Car Headlamp Reflectors*. in *8th International Symposium on Automotive Lighting*. 2009.
69. Queisser, J., M. Geprägs, and R.J.K.P.E. Bluhm, *Trends in automotive headlamps*. 2002. **92**(3): p. 32-34.
70. Delmonte, J., *Metal/polymer composites*. 2013: Springer.
71. KUSTER, H., D. PEROS, and K.J.P.O.P.-P.I.A.L. GANZ, HELD LABORATORY OF LIGHTING TECHNOLOGY, SEPTEMBER . VOL 8, *LARGE AREA COATING OF ALUMINIUM COILS FOR AUTOMOTIVE APPLICATIONS*. 2001.
72. NASCAM. 2018 [cited 2020; Available from: [www.fundp.ac.be/sciences/physique/pmr/telechargement/logiciels/nascam](http://www.fundp.ac.be/sciences/physique/pmr/telechargement/logiciels/nascam).
73. Abràmoff, M.D., P.J. Magalhães, and S.J.J.B.i. Ram, *Image processing with ImageJ*. 2004. **11**(7): p. 36-42.
74. Fontijn, A., *Gas phase metal reactions*. 2017: Elsevier.
75. Kaiser, N. and H.K. Pulker, *Optical interference coatings*. Vol. 88. 2013: Springer.
76. Vedam, K., *Optical characterization of real surfaces and films*. Vol. 19. 1994: Academic Pr.
77. Luersen, M.A., et al., *A constrained, globalized, and bounded Nelder–Mead method for engineering optimization*. 2004. **27**(1-2): p. 43-54.
78. Heavens, O.S., *Optical properties of thin solid films*. 1991: Courier Corporation.
79. Radwan, M., M. Bahgat, and A.J.J.o.t.E.C.S. El-Geassy, *Formation of aluminium nitride whiskers by direct nitridation*. 2006. **26**(13): p. 2485-2488.
80. Alder, F.A., et al., *Fabrication of robust solar mirrors on polymeric substrates by physical vapor deposition technique*. 2020. **209**: p. 110476.
81. Wagendristel, A. and Y. Wang, *An introduction to physics and technology of thin films*. 1994: World scientific.
82. Hora, J., et al., *Inorganic thin film deposition and application on organic polymer substrates*. 2018. **20**(5): p. 1700868.
83. Kazmerski, L., *Polycrystalline and amorphous thin films and devices*. 2012: Elsevier.
84. Xi, J.-Q., et al., *Very low-refractive-index optical thin films consisting of an array of SiO<sub>2</sub> nanorods*. 2006. **31**(5): p. 601-603.
85. Kumar, B.R., T.S.J.D.J.o.N. Rao, and Biostructures, *AFM studies on surface morphology, topography and texture of nanostructured zinc aluminum oxide thin films*. 2012. **7**(4): p. 1881-1889.

86. Bennett, H. and J.J.J. Porteus, *Relation between surface roughness and specular reflectance at normal incidence*. 1961. **51**(2): p. 123-129.
87. Palik, E.D., *Handbook of optical constants of solids*. Vol. 3. 1998: Academic press.

## ANEXO 1

### Tablas de las rugosidades y espesores empleados en nuestro trabajo.

A continuación, se reportan en las tablas subsiguientes los valores obtenidos de espesor y rugosidad para cada condición de experimentación, así como la desviación estándar de todos los valores obtenidos para las 20 iteraciones realizadas en cada espesor correspondiente a los intervalos de 5 nm, 12 nm, 25 nm y 50 nm. En el caso de los rangos de 80 y 100 nm se repitieron los experimentos 10 y 5 veces respectivamente por limitaciones de la capacidad de computo disponible.

Muestra	Espesor	$\sigma$	Rugosidad	$\sigma$
T1A0R0	5.33	0.17	1.94	0.03
T1A1R0	5.26	0.18	2.14	0.03
T1A2R0	5.57	0.25	2.03	0.04
T1A0R1	5.30	0.20	1.93	0.03
T1A1R1	5.37	0.22	2.15	0.04
T1A2R1	5.52	0.20	2.02	0.04
T2A0R0	5.25	0.15	1.93	0.04
T2A1R0	5.36	0.15	2.15	0.05
T2A2R0	5.42	0.25	2.02	0.04
T2A0R1	5.31	0.22	1.92	0.03
T2A1R1	5.42	0.27	2.14	0.04
T2A2R1	5.52	0.20	2.02	0.03

Muestra	Espesor	$\sigma$	Rugosidad	$\sigma$
T1A0R0	24.98	0.35	3.21	0.09
T1A1R0	26.90	0.30	3.51	0.13
T1A2R0	26.82	0.45	4.04	0.12
T1A0R1	25.02	0.36	3.26	0.09
T1A1R1	26.96	0.28	3.55	0.15
T1A2R1	26.88	0.39	4.00	0.13
T2A0R0	24.98	0.29	3.27	0.18
T2A1R0	26.99	0.46	3.54	0.12
T2A2R0	27.17	0.56	4.00	0.13
T2A0R1	24.93	0.24	3.20	0.25
T2A1R1	26.99	0.25	3.54	0.13
T2A2R1	27.02	0.30	3.99	0.14

Muestra	Espesor	$\sigma$	Rugosidad	$\sigma$
T1A0R0	52.59	0.28	3.87	0.14
T1A1R0	56.77	0.55	4.05	0.15
T1A2R0	56.19	0.55	5.07	0.21
T1A0R1	52.74	0.46	3.85	0.13
T1A1R1	56.65	0.43	3.98	0.14
T1A2R1	56.22	0.55	5.17	0.21
T2A0R0	52.65	0.25	3.88	0.12



T2A1R0	56.76	0.46	3.84	0.16
T2A2R0	56.27	0.74	5.13	0.21
T2A0R1	52.86	0.37	3.85	0.16
T2A1R1	56.82	0.60	4.17	0.18
T2A2R1	56.26	0.42	5.08	0.26

Muestra	Espesor	$\sigma$	Rugosidad	$\sigma$
T1A0R0	83.46	0.33	4.27	0.07
T1A1R0	90.15	0.21	4.11	0.10
T1A2R0	90.00	0.42	5.60	0.17
T1A0R1	83.35	0.42	4.16	0.22
T1A1R1	90.45	1.06	4.36	0.15
T1A2R1	89.85	1.50	5.57	0.01
T2A0R0	83.40	0.42	3.90	0.14
T2A1R0	90.00	0.50	4.19	0.04
T2A2R0	89.70	1.27	6.00	0.37
T2A0R1	83.10	0.00	4.11	0.23
T2A1R1	89.70	0.00	3.92	0.04
T2A2R1	89.70	0.84	5.79	0.10

Muestra	Espesor	$\sigma$	Rugosidad	$\sigma$
T1A0R0	99.60	0.42	4.50	0.36
T1A1R0	107.85	0.21	4.21	0.05
T1A2R0	106.35	1.06	6.22	0.29
T1A0R1	99.75	0.21	4.28	0.02
T1A1R1	108.00	0.00	4.33	0.18
T1A2R1	106.20	0.21	5.81	0.11
T2A0R0	99.90	0.00	4.19	0.13
T2A1R0	107.85	0.64	4.09	0.15
T2A2R0	106.35	1.90	5.61	0.35
T2A0R1	100.20	1.30	4.20	0.19
T2A1R1	107.70	0.21	3.95	0.19
T2A2R1	106.35	0.21	6.04	0.18